



**João Alexandre  
Dias de Oliveira**

## **Metodologias de Optimização Topológica em Cálculo Estrutural**

Topology Optimisation Methodologies for  
Structural Analysis

Tese apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação científica do Doutor Joaquim Alexandre Mendes de Pinho da Cruz e do Doutor Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias, Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro

Apoio financeiro do POCTI no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio.

Apoio financeiro da FCT e do FSE no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio.



## **o júri**

presidente

**Professora Doutora Nilza Maria Vilhena Nunes da Costa**

Professora Catedrática da Universidade de Aveiro

**Professor Doutor António Torres Marques**

Professor Catedrático da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

**Professor Doutor Vítor José Babau Torres**

Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

**Professor Doutor Filipe Miguel Horta e Vale Teixeira-Dias**

Professor Auxiliar com Agregação da Universidade de Aveiro (co-orientador)

**Professor Doutor Rogério Augusto da Costa Pereira Leal**

Professor Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

**Professor Doutor Pedro Samuel Gonçalves Coelho**

Professor Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

**Professor Doutor António Gil d'Orey de Andrade Campos**

Professor Auxiliar Convidado da Universidade de Aveiro

**Professor Doutor Joaquim Alexandre Mendes de Pinho da Cruz**

Professor Auxiliar Convidado da Universidade de Aveiro (orientador)





## agradecimentos

Aos meus três pilares, Filipa, João e Rui.

Ao Professor Doutor Alexandre Pinho da Cruz, pela orientação deste trabalho e pelo facto de muito desta dissertação e do meu crescimento científico se dever ao convívio diário com o seu elevado nível de raciocínio e conhecimento. Acima de tudo, como uma das pessoas que sinto como mais próximas, um agradecimento especial pela amizade que nos une.

Ao Professor Doutor Filipe Teixeira-Dias, como orientador, mas principalmente como amigo. Continua a ser um exemplo para mim, como pessoa e como profissional. Sempre presente desde uma fase muito inicial na minha formação académica, é um dos grandes responsáveis pelo facto de sempre ter seguido este caminho com prazer e motivação.

Ao Professor Doutor Gil Andrade-Campos, colega e grande amigo, pela sua fé e constante apoio. A sua contínua presença e preocupação serão sempre alvo da minha gratidão.

Ao Mestre Hugo Calisto, irmão de armas e de vida, amigo inabalável, companheiro de há longos anos nesta viagem.

Aos Professores Doutores Robertt Valente, Mónica Oliveira, Victor Neto e Ricardo Sousa, assim como a um restrito grupo de pessoas que realmente me enriquecem com a sua presença e contribuem diariamente para que seja feliz no local onde trabalho.

Ao GRIDS, repleto de pessoas que, desde o início, mantêm este grupo de investigação uma genuína família.

A todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para este trabalho ou simplesmente o facilitaram. Em particular, a todos os colegas e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro pelo apoio e por me fazerem sentir este local como uma verdadeira casa.

À Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), pelo apoio prestado no âmbito da bolsa SFRH/BD/24712/2005.

Aos meus pais, João Mário e Maria de Fátima, pelo trabalho, apoio e confiança com que sempre me permitiram perseguir o meu futuro. A eles, com orgulho, devo boa parte daquilo que sou como pessoa.

Aos meus avós.

A todos e a cada um deixo o mais sincero e grato abraço. Muito obrigado!



## palavras-chave

Desenvolvimento de ferramentas computacionais, optimização topológica, homogeneização, método dos elementos finitos, multiescala, processamento paralelo.

## resumo

A optimização estrutural é uma temática antiga em engenharia. No entanto, com o crescimento do método dos elementos finitos em décadas recentes, dá origem a um crescente número de aplicações. A optimização topológica, especificamente, surge associada a uma fase de definição de domínio efectivo de um processo global de optimização estrutural. Com base neste tipo de optimização, é possível obter a distribuição óptima de material para diversas aplicações e solicitações. Os materiais compósitos e alguns materiais celulares, em particular, encontram-se entre os materiais mais proeminentes dos nossos dias, em termos das suas aplicações e de investigação e desenvolvimento. No entanto, a sua estrutura potencialmente complexa e natureza heterogénea acarretam grandes complexidades, tanto ao nível da previsão das suas propriedades constitutivas quanto na obtenção das distribuições óptimas de constituintes. Procedimentos de homogeneização podem fornecer algumas respostas em ambos os casos. Em particular, a homogeneização por expansão assintótica pode ser utilizada para determinar propriedades termomecânicas efectivas e globais a partir de volumes representativos, de forma flexível e independente da distribuição de constituintes. Além disso, integra processos de localização e fornece informação detalhada acerca de sensibilidades locais em metodologias de optimização multiescala. A conjugação destas áreas pode conduzir a metodologias de optimização topológica multiescala, nas quais se procede à obtenção não só de estruturas óptimas mas também das distribuições ideais de materiais constituintes. Os problemas associados a estas abordagens tendem, no entanto, a exigir recursos computacionais assinaláveis, criando muitas vezes sérias limitações à exequibilidade da sua resolução. Neste sentido, técnicas de cálculo paralelo e distribuído apresentam-se como uma potencial solução. Ao dividir os problemas por diferentes unidades memória e de processamento, é possível abordar problemas que, de outra forma, seriam proibitivos.

O principal foco deste trabalho centra-se na importância do desenvolvimento de procedimentos computacionais para as aplicações referidas. Adicionalmente, estas conduzem a diversas abordagens alternativas na procura simultânea de estruturas e materiais para responder a aplicações termomecânicas. Face ao exposto, tudo isto é integrado numa plataforma computacional de optimização multiobjectivo multiescala em termoelasticidade, desenvolvida e implementada ao longo deste trabalho. Adicionalmente, o trabalho é complementado com a montagem e configuração de um *cluster* do tipo Beowulf, assim como com o desenvolvimento do código com vista ao cálculo paralelo e distribuído.



**keywords**

Development of computational tools, topology optimisation, homogenisation, finite element method, multiscale, parallel processing.

**abstract**

Structural optimisation has been a present field in engineering for some time. However, along with the growth of the finite element method in recent decades, it's increasingly leading to a variety of applications. Topology optimization, in particular, is associated to a stage of structural optimization where the study of a given ground structure renders an optimal material distribution for several applications and requirements. Composite and some cellular materials, on the other hand, are among the most prominent materials of today. However, its frequently complex and heterogeneous nature lead to some modelling complexities, both in terms of estimating effective properties and in terms of attaining optimal distributions. In either case, homogenisation methods may provide some answers. Among these methods, asymptotic expansion homogenisation proves an efficient tool to determine global thermomechanical properties based on representative volumes of the local material distributions. Moreover, it provides localisation tools and sensitivity information useful for optimisation methodologies. Joining both these fields allows the development of multiscale topology optimization procedures, where not only optimal structures are obtained but also optimal local constituent material distributions. A strong limitation of these procedures may be the sheer size of the problems, requiring substantial computational resources. In this sense, a parallel and distributed computation approach might provide an answer. The division of resources, in terms of memory and processing units, increases the allowed size or reduces the processing time of the problems to solve.

With this in mind, the main scope of this work is centred on the importance of developing computational tools. These tools result in several alternative approaches in the search for simultaneous optimal structures and materials in thermomechanical problems. In this work, a code was developed fully in-house to solve multiscale thermoelastic multiobjective topology optimisation problems. Also in this work, a Beowulf computer cluster was assembled and the code implemented in parallel structures.



**“Think lightly of yourself and deeply of the world.”**  
Miyamoto Musashi





# Conteúdo

<b>I</b>	<b>Enquadramento</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
1.1	Enquadramento . . . . .	3
1.2	Objectivos . . . . .	6
1.3	Guia de Leitura . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Conceitos Gerais de Optimização Estrutural</b>	<b>11</b>
2.1	Introdução . . . . .	11
2.2	Conceitos Gerais . . . . .	12
2.3	Condições de Óptimo do Problema de Variáveis Contínuas . . . . .	14
2.3.1	Problema Não-Restringido . . . . .	14
2.3.2	Problema Restringido . . . . .	15
2.3.3	Convexidade e Questões Adicionais . . . . .	16
2.4	Métodos de Optimização . . . . .	17
2.4.1	Conceitos Gerais . . . . .	17
2.4.2	Métodos de Gradiente . . . . .	19
2.4.2.1	Linearização e Programação Linear Sequencial . . . . .	19
2.4.2.2	Programação Quadrática Sequencial . . . . .	20
2.4.2.3	Métodos de Penalidade e Lagrangiano Aumentado . . . . .	20
2.4.3	Algoritmos Alternativos . . . . .	21
2.4.4	Optimização Multiobjectivo . . . . .	23
2.5	Optimização em Cálculo Estrutural . . . . .	24
2.5.1	Tipos de Optimização Estrutural . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Conceitos Gerais de Cálculo Paralelo</b>	<b>27</b>
3.1	Introdução . . . . .	27
3.2	Conceitos Gerais . . . . .	29
3.2.1	Arquitecturas e Redes em Computação Paralela . . . . .	29
3.2.2	Arquitecturas MIMD . . . . .	33
3.2.3	Avaliação de Desempenho . . . . .	34
3.3	Programação em Sistemas de Computação Paralela . . . . .	38
3.4	Interface de Passagem de Mensagens (MPI) . . . . .	39
3.4.1	Procedimentos de Gestão . . . . .	40
3.4.2	Procedimentos de Comunicação . . . . .	41
3.5	Novas Tendências do Processamento Paralelo e Distribuído . . . . .	45
<b>II</b>	<b>Modelação Matemática e Numérica</b>	<b>49</b>
<b>4</b>	<b>Modelação do Comportamento Termoelástico Linear</b>	<b>51</b>
4.1	Introdução . . . . .	51
4.2	Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Estacionário . . . . .	52

4.2.1	Formulação Diferencial . . . . .	52
4.2.2	Formulação Integral Fraca . . . . .	53
4.3	Problema Termoelástico . . . . .	53
4.3.1	Formulação Diferencial . . . . .	53
4.3.2	Formulação Integral Fraca . . . . .	54
4.4	Discretização Espacial pelo Método dos Elementos Finitos . . . . .	55
4.4.1	Problema Térmico . . . . .	55
4.4.2	Problema Termoelástico . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Optimização Topológica</b>	<b>59</b>
5.1	Introdução . . . . .	59
5.2	Definição do Problema . . . . .	60
5.3	Parametrização do Problema . . . . .	62
5.4	Instabilidades Numéricas em Optimização Topológica . . . . .	66
5.4.1	Filtros de Sensibilidade e Densidade . . . . .	68
5.4.2	Controlo de Perímetro . . . . .	71
5.5	Solicitações Dependentes de Variáveis de Projecto . . . . .	72
5.6	Métodos de Resolução . . . . .	75
5.7	Pós-Processamento de Resultados de Optimização Topológica . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Homogeneização por Expansão Assimptótica e Optimização Multiescala</b>	<b>81</b>
6.1	Introdução . . . . .	81
6.2	Homogeneização por Expansão Assimptótica . . . . .	83
6.2.1	Formulação Diferencial dos Problemas Térmico e Termoelástico . . . . .	83
6.2.2	Problemas Térmico e Termoelástico Homogeneizados . . . . .	86
6.3	Metodologias de Homogeneização . . . . .	88
6.4	Optimização Topológica Multiescala . . . . .	89
6.4.1	Formulação Hierárquica do Problema em Termoelasticidade . . . . .	91
6.4.2	Condições de Óptimo . . . . .	93
6.4.3	Problema Térmico . . . . .	95
6.5	Homogeneização Inversa . . . . .	96
6.6	Optimização Local . . . . .	98
<b>III</b>	<b>Implementação</b>	<b>101</b>
<b>7</b>	<b>Programa mainFRAN</b>	<b>103</b>
7.1	Introdução . . . . .	103
7.2	Método dos Elementos Finitos . . . . .	105
7.2.1	Elementos Finitos Isoparamétricos . . . . .	105
7.2.2	Condições de Fronteira . . . . .	105
7.2.2.1	Método de Eliminação . . . . .	110
7.2.2.2	Método de Penalidade . . . . .	111
7.2.2.3	Método dos Multiplicadores de Lagrange . . . . .	112
7.2.3	Armazenamento Matricial . . . . .	113
7.2.4	Resolução do Sistema de Equações . . . . .	114
7.2.4.1	Método do Gradiente Conjugado . . . . .	115
7.2.4.2	Técnicas de Precondicionamento . . . . .	116
7.3	Homogeneização por Expansão Assimptótica . . . . .	117
7.3.1	Cálculo de Correctores . . . . .	117
7.3.2	Matrizes Constitutivas Homogeneizadas . . . . .	118
7.3.3	Localização . . . . .	119

7.3.4	A Sub-Rotina Slavery . . . . .	119
7.4	Optimização Topológica . . . . .	120
7.4.1	Metodologia Geral . . . . .	121
7.4.2	Optimização Multiobjectivo . . . . .	123
7.4.3	Filtros . . . . .	124
7.4.4	Algoritmos de Optimização . . . . .	124
7.5	Optimização Topológica Multiescala . . . . .	127
7.5.1	Modelos Hierárquicos . . . . .	128
7.5.2	Algoritmos de Optimização Hierárquica . . . . .	132
7.5.3	Abordagem Local . . . . .	138
7.6	Pré- e Pós-Processamento . . . . .	139
7.7	Cálculo Paralelo . . . . .	139
7.7.1	Problemas Gerais do MEF . . . . .	140
7.7.2	Optimização Topológica . . . . .	140
7.7.3	Optimização Topológica Multiescala . . . . .	141
7.8	Considerações Gerais . . . . .	143
<b>8</b>	<b><i>Cluster</i> Beowulf TaranTux — Montagem e Configuração de um Sistema de Computação Paralela</b>	<b>147</b>
8.1	Enquadramento . . . . .	147
8.2	<i>Cluster</i> TaranTux . . . . .	149
8.2.1	<i>Hardware</i> dos Nós . . . . .	150
8.2.2	<i>Software</i> . . . . .	151
8.2.2.1	Sistema Operativo . . . . .	152
8.2.2.2	Configuração do Sistema . . . . .	153
8.2.3	Monitorização e Gestão . . . . .	157
8.2.4	Âmbito de Utilização . . . . .	158
8.3	Considerações Adicionais . . . . .	158
<b>IV</b>	<b>Apresentação, Validação e Discussão de Resultados</b>	<b>161</b>
<b>9</b>	<b>Validação e Resultados Preliminares</b>	<b>163</b>
9.1	Introdução . . . . .	163
9.2	Homogeneização por Expansão Assimptótica . . . . .	164
9.2.1	Análise de Propriedades de Materiais Compósitos . . . . .	164
9.2.2	Células Representativas Unitárias Hexagonais . . . . .	173
9.2.3	Cálculo Multiescala e Localização . . . . .	176
9.3	Optimização Topológica . . . . .	185
9.3.1	Estudos Gerais . . . . .	186
9.3.1.1	SIMP e Implicações Numéricas . . . . .	188
9.3.1.2	Abordagem Aproximada . . . . .	204
9.3.2	Termoelasticidade . . . . .	207
9.3.3	Cálculo Multiobjectivo . . . . .	212
9.3.3.1	Exemplos 3-D . . . . .	221
9.4	Optimização Topológica Multiescala . . . . .	221
9.4.1	Optimização de Material . . . . .	223
9.4.1.1	Abordagem Local . . . . .	223
9.4.1.2	Homogeneização Inversa . . . . .	226
9.4.1.3	Detalhes Numéricos . . . . .	229
9.4.1.4	Exemplos 3-D . . . . .	243
9.4.2	Optimização Macroestrutural . . . . .	246

9.4.3	Optimização Hierárquica em Elasticidade . . . . .	252
<b>10</b>	<b>Desempenho em Processamento Paralelo</b>	<b>273</b>
10.1	Introdução . . . . .	273
10.2	Análise de Desempenho . . . . .	274
10.3	Optimização Topológica . . . . .	276
10.3.1	Optimização Topológica Sem Filtro . . . . .	279
10.3.2	Utilização de um Filtro de Sensibilidades . . . . .	282
10.4	Cálculo Multiescala Distribuído . . . . .	288
10.4.1	Cálculo Paralelo e Condicionamento . . . . .	289
10.4.2	Cálculo Distribuído . . . . .	295
<b>11</b>	<b>Aplicações Gerais</b>	<b>305</b>
11.1	Introdução . . . . .	305
11.2	Optimização Multiescala Multiobjective . . . . .	305
11.3	Estratégias Alternativas de Optimização Multiescala . . . . .	314
11.3.1	Optimização Topológica Microestrutural . . . . .	315
11.3.2	Optimização Topológica Multiescala Desacoplada . . . . .	320
11.3.3	Optimização Topológica Multiescala em Subdomínios . . . . .	323
11.4	Exemplos de Aplicação 3-D . . . . .	329
<b>12</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>339</b>
12.1	Conclusões . . . . .	339
12.1.1	Homogeneização por Expansão Assimptótica . . . . .	339
12.1.2	Optimização Topológica . . . . .	340
12.1.3	Optimização Topológica Multiescala . . . . .	341
12.1.4	Desempenho em Processamento Paralelo . . . . .	343
12.1.5	Aplicações Gerais . . . . .	344
12.2	Perspectivas de Trabalho Futuro . . . . .	346
<b>A</b>	<b>Notação, Nomenclatura, Siglas e Acrónimos</b>	<b>347</b>
A.1	Conceitos Gerais de Optimização . . . . .	347
A.2	Conceitos Gerais de Cálculo Paralelo . . . . .	348
A.3	Termoelasticidade Linear . . . . .	348
A.4	Optimização Topológica . . . . .	349
A.5	Homogeneização e Optimização Multiescala . . . . .	352
A.6	Programa mainFRAN . . . . .	355
A.7	Discussão de Resultados . . . . .	357
A.8	Siglas e Acrónimos . . . . .	359
<b>B</b>	<b>Estratégias de Optimização Topológica Multiescala em Subdomínios</b>	<b>363</b>
B.1	Introdução . . . . .	363
B.2	Formulação do Problema em Elasticidade Linear . . . . .	363
<b>C</b>	<b>Cluster Beowulf — Arquitectura de Nós, Rede e Periféricos</b>	<b>367</b>
C.1	Arquitectura de Nós . . . . .	367
C.2	Rede e Periféricos . . . . .	371
<b>D</b>	<b>Lista de Figuras</b>	<b>375</b>
<b>E</b>	<b>Lista de Tabelas</b>	<b>391</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>391</b>

Parte I

Enquadramento



# Capítulo 1

## Introdução

*Procede-se ao enquadramento das temáticas abordadas e definem-se os objectivos gerais do trabalho. Descreve-se a estrutura deste documento e faz-se um guia geral da sua leitura.*

---

Neste capítulo introduzem-se sucintamente as temáticas e motivações que regem o trabalho desenvolvido. Abordam-se os objectivos gerais do trabalho e faz-se o enquadramento geral no contexto de aplicações multiescala e optimização topológica. Apresenta-se ainda um guia de leitura, destinado a esclarecer a estrutura adoptada ao longo deste documento.

### 1.1 Enquadramento

O desenvolvimento da temática de estruturas em engenharia envolve actualmente disciplinas transversais a várias áreas de conhecimento científico. Uma das principais áreas de relevo diz respeito ao desenvolvimento de materiais de engenharia como resposta a solicitações específicas. A este nível, grande atenção tem sido dada ao estudo e à manipulação da microestrutura dos materiais, seja em termos de controlo da estrutura cristalina ou de grão seja ao nível da microestrutura de materiais com distribuições particulares de constituintes. Na realidade, grande parte dos materiais de engenharia modernos são constituídos por diferentes fases, diferenciáveis numa dada escala dimensional. Destacam-se os materiais compósitos, caracterizados por dois ou mais constituintes que diferem em forma e em composição química. Outros materiais heterogéneos são, por exemplo, o osso, a madeira ou os materiais com gradiente funcional de propriedades (*Functionally Graded Materials* — FGM). Note-se ainda que alguns destes materiais podem também enquadrar-se na categoria de materiais celulares, dos quais se destacam ainda a cortiça ou as espumas metálicas. Em todos estes casos, às fases que constituem as suas microestruturas encontram-se associadas interacções que originam um comportamento global diferente do de cada material constituinte. Este facto levanta duas questões relevantes. Por um lado, qual será o comportamento efectivo do material e como se deverá fazer a sua avaliação? Por outro lado, qual será a combinação ideal de constituintes para que um dado material seja uma boa solução para uma determinada aplicação estrutural? A conjugação destas questões constitui, a vários níveis, a principal motivação do trabalho aqui apresentado, estando na origem do recurso a metodologias de homogeneização em conjugação com aplicações de optimização.

A homogeneização é um processo pelo qual se faz a avaliação do comportamento efectivo de um dado material heterogéneo a partir da distribuição dos seus constituintes. Estas estimativas têm uma elevada importância, já que determinam a qualidade das aproximações obtidas em simulação numérica. Além disso, levam tipicamente a uma redução de requisitos computacionais ao evitar a modelação detalhada da microestrutura do material. Note-se, no entanto, que, em termos históricos, as tendências iniciais para o cálculo das propriedades efectivas de materiais heterogéneos são de previsão matemática de limites [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892, Hashin 1962, Hashin e Shtrikman 1963, Hill 1963, Hashin e Rosen 1964]. Metodologias analíticas, como as leis de misturas, ou fórmulas semiempíricas, como as equações de Halpin-Tsai, podem ser utilizadas, mas revelam-se limitativas em termos da qualidade da previsão de propriedades devido ao seu fundamento físico pouco abrangente [Böhm 2012]. No entanto, geometrias simples com distribuições predefinidas de inclusões esféricas ou cilíndricas, por exemplo, permitem a utilização destes métodos analíticos [Chung 1999]. Metodologias mais complexas surgem usualmente por associação a simulação numérica, nomeadamente em conjugação com o Método dos Elementos Finitos (MEF). Assim, as estratégias de homogeneização visam obter a resposta de um dado elemento de volume a um conjunto de condições de fronteira, a partir da qual se deduzem as propriedades globais. As metodologias de homogeneização mais comuns podem ser subdivididas em dois grupos principais. O primeiro grupo é constituído por métodos que consideram os pormenores da microgeometria de materiais heterogéneos com base em informações estatísticas. São incluídos neste grupo os métodos de campo médio (*Mean Field Approaches* — MFA) e os métodos de limites por princípios variacionais (*Variational Bounding Methods* — VBM) [Böhm 2012]. O segundo grupo de aproximações baseia-se no estudo de microestruturas discretas e inclui as metodologias de campo periódico (*Periodic Microfield Approaches* — PMA), de células embebidas (*Embedded Cell Approaches* — ECA) e de janelas (*Windowing Approaches*) [Böhm 2012]. Neste trabalho utiliza-se a metodologia de Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA). Esta pode incluir-se nas metodologias de campo periódico (ou métodos de célula unitária), onde o material heterogéneo é aproximado por um modelo infinito com um arranjo periódico de fases constituintes. Tipicamente, estas metodologias permitem a análise de uma grande variedade de microestruturas, bi- ou tridimensionais, recorrendo a Células Representativas Unitárias (CRU) e a condições de fronteira específicas [Chung 1999]. Em particular, a HEA permite considerar explicitamente o processamento da estrutura global (macroescala) e o processamento do detalhe ao nível microestrutural do material (microescala) num processo designado por multiescala [Böhm 2012]. Esta característica é relevante ao nível da obtenção de propriedades homogeneizadas do material heterogéneo utilizado. É ainda muito importante, destacando-se da generalidade dos métodos de homogeneização, o facto de permitir verificar de forma detalhada o comportamento do material na microescala com base em resultados da macroescala, num processo designado de localização. Grande parte das aplicações da homogeneização por expansão assintótica surge em problemas de mecânica estrutural. As formulações mais comuns aplicam-se a problemas simples de elasticidade [Bensoussan *et al.* 1978, Sanchez-Palencia 1980, Guedes e Kikuchi 1990, Hollister e Kikuchi 1992, Terada e Kikuchi 1996, Chung *et al.* 2001], mas observam-se outros desenvolvimentos aprofundados na medida da complexidade dos problemas. Destacam-se, a título de exemplo, áreas de aplicação como a biomecânica, no estudo das propriedades efectivas das estruturas porosas do osso trabecular [Hollister *et al.* 1991], a análise localizada de dano, nomeadamente em materiais compósitos de fibras contínuas [Lene e Paumelle 1992, Whitcomb 1991], a geomecânica, considerando aplicações a rochas porosas [Kawamoto e Kyoya 1993], o cálculo estrutural de elementos discretos (vigas), incluindo graus de liberdade de rotação [Lefik e Shrefler 1994], a termoelasticidade [Dasgupta *et al.* 1996, Terada 1996], a nanotecnologia [Song e Youn 2006], *etc.* Refira-se que a HEA pode ser utilizada para aplicações em regime inelástico, já que o procedimento de localização permite a obtenção do detalhe local associado às grandezas calculadas ao nível macroestrutural. É assim possível actualizar o comportamento da microescala em função do estado local e actual em cada iteração. Esta é, aliás, uma característica que está na origem de aplicações como o trabalho pioneiro de Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988]. Os autores introduzem uma metodologia de optimização topológica,



relaxando o problema de otimização para incluir a evolução microestrutural do material em cada ponto da macroescala. A HEA é utilizada para actualizar as propriedades das microestruturas em cada iteração do processo de otimização. Este trabalho revela-se um trabalho de referência não só ao nível de aplicação da homogeneização por expansão assintótica mas também incontornável no campo da optimização topológica estrutural, abrindo caminho a novas abordagens gerais do problema e, em particular, às abordagens multiescala aqui estudadas.

Na sequência do exposto, outra parte essencial deste trabalho centra-se na optimização estrutural, que visa a manipulação da configuração de uma estrutura para responder a um dado objectivo, *e.g.* mecânico ou térmico. Em particular, foca-se especificamente a optimização topológica, um dos três tipos principais de optimização estrutural (optimização dimensional ou paramétrica, optimização topológica e optimização de forma) [Silva 2010]. Neste caso, a função-objectivo é optimizada actuando sobre a distribuição de material ao longo de um domínio predefinido. As variáveis utilizadas, tipicamente variáveis de densidade ou magnitude das propriedades em análise, permitem o controlo da quantidade ou mesmo da natureza do material existente em cada ponto da estrutura, oscilando entre material homogéneo e ausência de material. Numa abordagem multiescala, é ainda possível considerar a existência de estados intermédios, correspondentes a microestruturas de materiais compósitos ou celulares que traduzem não só determinadas densidades intermédias mas também uma virtualmente inumerável variedade de propriedades constitutivas. É neste campo que o trabalho de Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988], referido anteriormente, se apresenta como basilar. Com a solução apresentada, os autores relaxaram o problema de optimização topológica, *i.e.* alargaram o domínio admissível, permitindo que a sua parametrização contivesse muito mais informação e detalhe do que simplesmente a existência ou não de material. Para além de outras abordagens multiescala, nomeadamente com a utilização de materiais laminados [Thomsen 1992, Jacobsen 1998, Allaire e Aubry 1999], surgem posteriormente outras soluções de relaxação destes problemas, de onde se destaca a metodologia de penalização de densidades intermédias SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*) [Rozvany *et al.* 1992, Bendsøe e Sigmund 1999]. Na maioria dos casos, as aplicações multiescala apresentam-se de acordo com a definição paramétrica de microestruturas predefinidas, seja na forma de inclusões particulares [Bendsøe e Kikuchi 1988, Nishiwaki *et al.* 1998, Fernandes *et al.* 1999] seja na forma de diferentes tipos de laminados. Contudo, este trabalho centra-se num grupo de problemas que considera a optimização ao nível da microescala sem uma microestrutura predefinida [Sigmund e Torquato 1997, Sigmund 2000, Rodrigues *et al.* 2002, de Kruijf *et al.* 2007, Coelho *et al.* 2008a, Kang *et al.* 2010]. Estas abordagens são usualmente mais complexas, mas permitem a obtenção de uma maior variedade de soluções. Permitem ainda alguma flexibilidade no tipo de resolução do problema, potenciando uma maior liberdade ao nível das soluções obtidas. Em contrapartida, estas abordagens acarretam normalmente algumas limitações ao nível da sua aplicação prática. Em grande medida por essa razão, verifica-se que os trabalhos mais relevantes a este nível se centram em aplicações biomecânicas [Coelho *et al.* 2008a, Coelho 2009, Coelho *et al.* 2011b], onde a topologia das estruturas ósseas, optimizadas na natureza de acordo com uma resposta mecânica contínua, surge como o domínio de aplicação ideal. Refira-se que a HEA, devido às vantagens enunciadas anteriormente, se revela uma ferramenta adequada a estas aplicações. Para além da independência relativamente ao tipo de microestrutura obtida na avaliação das correspondentes propriedades constitutivas, o processo de optimização multiescala é em grande medida controlado por formas de localização que permitem a avaliação microestrutural da influência de campos macroestruturais.

A abordagem multiescala aqui apresentada é sustentada no desenvolvimento de uma plataforma computacional implementada para o efeito ao longo deste trabalho. O programa desenvolvido permite a resolução de uma grande variedade de problemas. No entanto, muitos dos problemas resolvidos tendem a apresentar dimensões e custos computacionais proibitivos. Neste sentido, uma potencial resposta para estas limitações reside na consideração de metodologias de cálculo paralelo e distribuído. A computação paralela consiste essencialmente na resolução mais rápida de uma tarefa através da utilização simultânea de múltiplos processadores que comunicam e executam operações para a redução dos tempos de processamento. Em simulação numérica, tal como na generalidade

dos casos, o processamento paralelo envolve requisitos a dois níveis, *software* e *hardware*. Por um lado, um programa tem de ser desenvolvido e compilado de modo a incluir tanto procedimentos preparados para serem executados de modo concorrente quanto uma gestão de memória e de execução que atenda a divisões de domínio e comunicações entre processos. Por outro lado, um sistema de computação paralela, independentemente do tipo de arquitectura utilizado, tem de ser constituído por diferentes processadores, capazes de processar em simultâneo blocos de dados e/ou instruções, e de meios de controlo e comunicação, para garantir o sincronismo e a transmissão desses blocos. Neste trabalho, actua-se a ambos os níveis. O código foi desenvolvido atendendo aos requisitos do cálculo paralelo, ao mesmo tempo que se construiu e configurou uma máquina de processamento paralelo do tipo *cluster* Beowulf.

## 1.2 Objectivos

As aplicações das metodologias referidas anteriormente são ainda reduzidas, devido à complexidade e dimensão dos problemas envolvidos. Além disso, o seu âmbito de aplicação é algo limitado, devido à dificuldade de fabrico dos materiais e estruturas obtidos. Por essa razão, são essencialmente usadas para aplicações biomecânicas, com as microestruturas ósseas a constituir um natural paralelo com fenómenos naturais de optimização. Neste trabalho visa-se, por um lado, alargar este tipo de aplicação a materiais compósitos e a tipos de problemas alternativos, como a termoelasticidade e a condução de calor, assim como a abordagens multiobjectivo. Por outro lado, pretende-se desenvolver estratégias alternativas conducentes a aplicações mais viáveis em termos de fabrico de estrutura e material, compósito ou celular.

O principal objectivo deste trabalho é o desenvolvimento de um programa de simulação numérica, tendo como base o método dos elementos finitos. Todo este programa é construído com código específico, desenvolvido e implementado no âmbito deste trabalho. Pretende-se que seja uma ferramenta de cálculo para diversas aplicações, constituindo uma base de teste e desenvolvimento para trabalhos futuros. Neste contexto, os objectivos gerais deste trabalho podem resumir-se no desenvolvimento e implementação de diversas metodologias de cálculo, onde se inserem:

- i) Módulos bi- e tridimensionais de cálculo elástico, termoelástico e térmico;
- ii) Módulos de optimização topológica, em diferentes configurações e tipos de problema;
- iii) Metodologias que optimizem a aplicação de condições de fronteira de periodicidade no modelo de célula representativa unitária, flexíveis para diferentes tipos de elemento finito e células representativas unitárias;
- iv) Estratégias de optimização microestrutural de materiais compósitos ou celulares;
- v) Estratégias de optimização multiescala, nomeadamente com modelos hierárquicos, ao nível do comportamento termomecânico, térmico e ambos (multiobjectivo);
- vi) Estruturas de optimização multiescala hierárquica alternativas, mais orientadas para distribuições regulares periódicas de constituintes e, por conseguinte, para aplicações reais com materiais compósitos;
- vii) Uma plataforma flexível de cálculo que permita a resolução de uma variedade de problemas de elementos finitos e de optimização topológica, segundo diversas configurações alternativas;
- viii) Uma plataforma numérica totalmente paralelizada, quer em termos de resolução dos problemas de elementos finitos quer ao nível das estruturas algorítmicas de optimização.

Aos objectivos referidos anteriormente, acrescenta-se um objectivo adicional. Durante o decorrer do trabalho, surgiu a oportunidade de construir uma máquina de processamento paralelo do tipo

*cluster* Beowulf. Assim, tornou-se parte deste trabalho a definição e a aquisição dos componentes necessários, montagem, configuração, gestão e manutenção desta máquina.

Pretende-se ainda que este documento possa ser consultado por leitores não-especializados. Nesse sentido, procede-se sempre que possível à apresentação de conceitos essenciais para o enquadramento em cada uma das matérias fundamentais do trabalho.

### 1.3 Guia de Leitura

Pretende-se que este documento, para além do interesse intrínseco no âmbito do trabalho realizado, possa fornecer uma base introdutória para algumas das temáticas aqui tratadas. Assim, inclui algumas considerações fundamentais sobre as diversas áreas, de modo a permitir uma compreensão sequencial e sustentada das análises. Refira-se ainda que, na elaboração deste trabalho, optou-se por uma divisão definida na elaboração de capítulos curtos e tão auto-suficientes quanto possível. Estes, por sua vez, encontram-se distribuídos por quatro partes principais da estrutura global da dissertação. Na figura 1.1 ilustra-se a estrutura geral deste documento, assim como as principais dependências das matérias abordadas. Esta estrutura é resumida nos parágrafos seguintes.

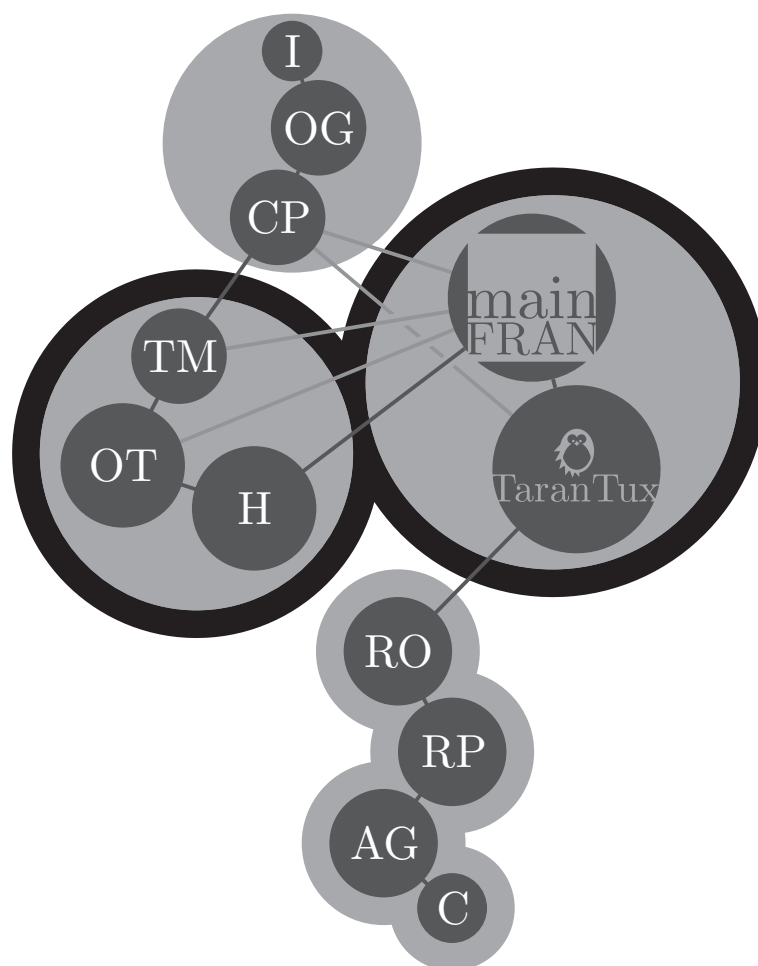


Figura 1.1: Esquema sinóptico da dissertação.

Na primeira parte, intitulada de **Enquadramento** e iniciada com o **Capítulo 1**, intitulado

**Introdução (I)**, faz-se a presente introdução ao trabalho e descreve-se um conjunto de conceitos elementares necessários para a compreensão e enquadramento dos dois temas centrais. O **Capítulo 2**, intitulado **Conceitos Gerais de Otimização Estrutural**, faz uma breve introdução a conceitos elementares de otimização (OG). Estes são abordados de forma geral e transversal a diferentes aplicações, apesar de centrados no âmbito de influência deste trabalho. Neste sentido, é feita ainda uma contextualização geral da otimização em aplicações de mecânica estrutural, com particular foco na otimização topológica. Segue-se o **Capítulo 3, Conceitos Gerais de Cálculo Paralelo**. Aqui apresentam-se aspectos elementares de computação concorrente, isto é, paralela e/ou distribuída (CP). Abordam-se questões gerais de *hardware* e de *software*, incluindo metodologias de avaliação de desempenho. Referem-se ainda algumas tendências actuais no processamento paralelo e distribuído.

Na segunda parte deste trabalho, intitulada **Modelação Matemática e Numérica**, definiu-se a formulação da generalidade dos problemas abordados neste trabalho. Esta é feita de acordo com a sua base matemática e a sua aplicação numérica. Note-se que a este nível existe uma constante e subjacente ligação ao MEF. O **Capítulo 4** é o primeiro da segunda parte, com o título **Modelação do Comportamento Termoelástico Linear**. Tecem-se aqui algumas considerações acerca do comportamento dos materiais aqui utilizados e o equilíbrio das estruturas analisadas. Este comportamento é considerado linear, quer em termos mecânicos quer térmicos. Nesse sentido, define-se a formulação matemática do problema linear de condução de calor térmico e do problema linear desacoplado de termoelasticidade (TM). Procede-se ainda às suas discretizações espaciais pelo método dos elementos finitos. Segue-se o **Capítulo 5**, designado de **Otimização Topológica**. Este capítulo centra-se na otimização estrutural topológica (OT). Define-se aqui o problema geral, de aplicação mecânica, térmica e multiobjectivo. Dá-se especial relevo à sua parametrização e às suas implicações, em particular em termos de instabilidades numéricas e métodos de resolução. Por fim, o **Capítulo 6** é intitulado **Homogeneização por Expansão Assimptótica e Otimização Multiescala**. Este capítulo começa por formular os problemas de Homogeneização por Expansão Assimptótica de condução de calor e termoelasticidade, esclarecendo as metodologias gerais de homogeneização e localização. Posteriormente, enquadra este tipo de homogeneização em aplicações de otimização multiescala (H). Particular atenção é dada ao problema de otimização hierárquica nas suas diferentes aplicações. É ainda apresentada uma abordagem local de otimização topológica, convertendo a formulação geral de otimização topológica para aplicações locais com condições de fronteira específicas.

A terceira parte designa-se por **Implementação**, e diz respeito ao desenvolvimento e implementação dos diversos procedimentos e métodos necessários para a resolução dos problemas abordados. Divide-se em dois capítulos, relativos ao desenvolvimento de *software* e à montagem e configuração de sistemas de *hardware* de computação paralela. Assim, o **Capítulo 7**, intitulado **Programa mainFRAN**, aborda as questões mais relevantes no desenvolvimento do programa de simulação numérica. Chamado de mainFRAN, este programa permite a resolução de uma considerável variedade de problemas. Sendo não só uma ferramenta de simulação mas também uma ferramenta de estudo, está construído de forma a incluir diversas metodologias e estratégias de funcionamento, com um controlo exaustivo de uma multiplicidade de parâmetros e configurações. No **Capítulo 8, Cluster Beowulf TaranTux – Montagem e Configuração de um Sistema de Computação Paralela**, tecem-se algumas considerações sobre a montagem de máquinas de computação paralela utilizando componentes de consumo geral (*e.g.* *cluster* Beowulf). Este capítulo constitui uma referência da configuração específica do *cluster* TaranTux.

A quarta parte deste trabalho é intitulada **Apresentação, Validação e Discussão de Resultados**. O principal foco desta parte é o comportamento geral da ferramenta desenvolvida. Nesse sentido, tenta-se manter uma sequência lógica na abordagem da variedade de problemas em resolução e, em especial, das diferentes metodologias utilizadas.

Inicia-se assim com o **Capítulo 9, Validação e Resultados Preliminares (RO)**. Começa-se neste caso com a resolução de problemas de avaliação do comportamento de materiais compósitos com recurso a metodologias de homogeneização e localização. Seguem-se problemas de otimização

topológica. Estes são apresentados de forma sequencial, com otimização macroestrutural e otimização multiescala. Os procedimentos multiescala são divididos entre otimização microestrutural, otimização macroestrutural com homogeneização e otimização hierárquica. Abordam-se aqui problemas mecânicos gerais, remetendo-se aplicações mais específicas para os capítulos seguintes. Note-se que neste capítulo se dá particular relevo à influência de parâmetros e metodologias nos resultados obtidos. O **Capítulo 10, Desempenho em Processamento Paralelo**, centra-se no desempenho do programa mainFRAN na execução em paralelo no *cluster* TaranTux (RP). Testam-se aqui diferentes configurações de cálculo, particularmente o processamento de problemas de otimização hierárquica e as diferentes estratégias para melhorar o seu desempenho. Por sua vez, no **Capítulo 11, intitulado Aplicações Gerais (AG)**, abordam-se aplicações de otimização topológica multiescala segundo estratégias alternativas de otimização hierárquica desenvolvidas neste trabalho. Por um lado, apresentam-se problemas térmicos e multiobjectivo. Por outro lado, mais adequados à utilização de materiais compósitos, resolvem-se problemas de otimização microestrutural com actualização macroestrutural e problemas desacoplados de otimização multiescala. Por fim, no **Capítulo 12, Considerações Finais**, apresentam-se algumas conclusões e faz-se uma apreciação geral do trabalho (C). Reflete-se ainda sobre algumas perspectivas de trabalho futuro.

Para além da **Bibliografia**, este texto inclui também alguns apêndices. O **Apêndice A** consiste num guia de **Notação, Nomenclatura, Siglas e Acrónimos**. Intitulado **Estratégias de Otimização Topológica Multiescala em Subdomínios**, o **Apêndice B** contém alguns detalhes adicionais acerca da metodologia de otimização topológica multiescala utilizando um problema global dividido em subdomínios, assim como algumas considerações acerca de outras metodologias multiescala desenvolvidas neste trabalho. O **Apêndice C** intitula-se **Cluster Beowulf — Arquitectura de Nós, Rede e Periféricos**, e descreve sumariamente os principais componentes de *hardware* relevantes em *clusters* Beowulf. Os **Apêndices D** e **E**, por sua vez, apresentam as listas de figuras e tabelas, respectivamente.

Refira-se ainda que o texto aqui apresentado foi estruturado de modo a poder ser consultado por leitores com diferentes objectivos. Desta forma, para além da dissertação aqui documentada, pretende-se que o texto contenha, sempre que possível, alguns tópicos introdutórios acerca das áreas abordadas. Assim, será possível adoptar diferentes abordagens na leitura deste documento consoante o interesse do leitor. Destacam-se três abordagens alternativas, ilustradas na tabela 1.1. Uma abordagem pedagógica deve incluir os capítulos 2 e 3 da Parte I. Estes capítulos são introdutórios nas áreas da optimização e da computação paralela. Uma leitura avançada pode dispensar estes capítulos e avançar para a Parte II, onde se estabelecem os fundamentos teóricos do trabalho aqui apresentado. Uma abordagem mais prática, por sua vez, pode incidir preferencialmente sobre a Parte III e a Parte IV, especificamente dedicadas a aspectos de implementação e discussão de resultados, respectivamente.

Tabela 1.1: Representação esquemática de possíveis abordagens alternativas a adoptar na leitura desta dissertação.

Capítulo	Leitura		
	Pedagógica	Avançada	Prática
I			
II			
III			
IV			

## Capítulo 2

# Conceitos Gerais de Optimização Estrutural

*Introduzem-se alguns conceitos elementares de optimização relevantes no contexto deste trabalho. Descrevem-se sumariamente algumas metodologias de optimização. Abordam-se os principais tipos de aplicação de optimização em cálculo estrutural.*

---

### 2.1 Introdução

O conceito de optimização aborda problemas de decisão com alguma elegância, envolvendo a selecção de valores para um dado conjunto de variáveis e focando-se num determinado objectivo, estabelecido para quantificar o desempenho e a qualidade da decisão. Este objectivo é maximizado ou minimizado, dependendo da formulação, e sujeito a restrições. Note-se que é rara a capacidade de representar completamente todos os factores que influenciam um determinado processo de decisão, pelo que, como acontece com a maioria dos processos numéricos, a optimização deve ser abordada apenas como uma aproximação. Assim, a optimização – em particular abordagens como as apresentadas neste trabalho – estabelece-se mais como ferramenta de conceptualização e análise do que como algo que garanta a solução universalmente mais correcta [Luenberger e Ye 2008]. São aqui relevantes os fundamentos teóricos, assim como a correcta formulação dos problemas, manipulação e afinação dos modelos, e interpretação dos resultados.

Os processos de obtenção de soluções óptimas para um problema de engenharia são variados. A abordagem puramente analítica depende directamente de metodologias de análise matemática, e torna-se demasiado complexa ou mesmo impraticável para muitos problemas de engenharia. Na realidade, a abordagem tradicional de optimização estrutural em engenharia centra-se em processos empíricos ou em análises parametrizadas, nomeadamente com recurso a simulação numérica. No entanto, abordar a optimização com estratégias empíricas ou de análise paramétrica por tentativa apenas faz sentido quando o número de casos a estudar é muito reduzido. A evolução da mecânica computacional, em contrapartida, abre caminho à maior disponibilidade de ferramentas de optimização mais completas e eficientes. Com o aumento da dimensão dos problemas ou da gama de variáveis a controlar, a opção eficiente recai forçosamente sobre algoritmos de optimização numérica, contribuindo para reduzir drasticamente o tempo necessário para encontrar a solução



óptima, assim como oferecendo mais garantias de obtenção da solução efectivamente óptima para as condições estudadas.

Neste capítulo, descrevem-se brevemente os conceitos gerais que presidem à utilização de técnicas de optimização numérica. Posteriormente, o texto centra-se nas formas comuns de optimização estrutural e no seu enquadramento neste trabalho, contextualizando as metodologias de optimização topológica aqui desenvolvidas e implementadas. Salientam-se algumas obras como referências fundamentais deste capítulo, aconselhadas para o aprofundamento das temáticas abordadas [Belegundu e Chandrupatla 1999, Arora 2004, Arora 2007b, Luenberger e Ye 2008].

## 2.2 Conceitos Gerais

Para estudar os problemas de optimização abordados neste trabalho é conveniente introduzir um conjunto de conceitos associados a este tipo de estudo. Estes conceitos são comuns e transversais em optimização, funcionando como uma forma de uniformizar a sua abordagem. À semelhança do que é apresentado de forma quase uniforme na bibliografia [Belegundu e Chandrupatla 1999, Quarteroni *et al.* 2000, Arora 2004, Baldick 2006, Luenberger e Ye 2008, Rao 2009], por uma questão de conveniência e padronização, consideram-se problemas genéricos de minimização, referindo, quando adequado, os detalhes relevantes para um problema de maximização.

Um passo crítico na resolução de um problema de optimização é a sua tradução para linguagem matemática. Se a formulação do problema não for adequada, a solução será provavelmente desadequada [Arora 2007a]. Assim, é necessário prestar particular atenção à formulação de um problema de optimização. Neste sentido, qualquer problema é constituído por três elementos essenciais: as variáveis de optimização ou de projecto, representadas pelo vector  $\mathbf{x}$ ; a função-custo ou função-objectivo,  $f(\mathbf{x})$ ; as restrições,  $g_i(\mathbf{x})$ , expressas como restrições de igualdade (equações) ou desigualdade (inequações). As variáveis do problema podem ser contínuas ou discretas. Dependendo das variáveis e das funções-objectivo associadas, obtém-se problemas de variáveis contínuas, de variáveis discretas, diferenciáveis e não-diferenciáveis. Os diferentes tipos de problemas são resumidamente descritos em seguida.

Qualquer problema de optimização com variáveis contínuas pode ser resolvido com modelos de programação não-linear (PNL). Um problema  $P$  típico traduz-se na procura do vector  $\mathbf{x}$ , de  $n$  variáveis, que minimiza a função-objectivo  $f(\mathbf{x})$  sujeita a um conjunto de restrições  $g(\mathbf{x})$ , de igualdade ou desigualdade. Este problema pode escrever-se na forma típica de programação matemática como

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a} \quad & g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p \\ & g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{2.1}$$

em que  $p$  é o número de restrições de igualdade e  $m$  é o número total de restrições. O domínio admissível de  $\mathbf{x}$  corresponde a todos os pontos que satisfazem as restrições  $g$  e pode ser representado alternativamente como

$$R = \left\{ \mathbf{x} \mid g_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, p; g_j(\mathbf{x}) \leq 0, j = p + 1, \dots, m \right\}. \tag{2.2}$$

Note-se que o domínio admissível de um problema pode ser vazio se existirem demasiadas restrições ou se estas forem incoerentes. Isto é habitualmente difícil de detectar antes da resolução do problema, devendo a formulação ser analisada e eventualmente relaxarem-se restrições. Note-se também que nem sempre é possível saber de antemão se o problema tem solução. No entanto, atendendo a algumas considerações iniciais acerca das funções que o definem, é possível verificar a existência de solução para vários problemas. Se  $f(\mathbf{x})$  é contínua num domínio  $R$  não-vazio, todas as restrições são contínuas e todas as restrições de desigualdade contêm os seus pontos de fronteira (*i.e.* definidas por  $\leq$  ou  $\geq$ ), então existe uma solução para o problema de optimização. Nesta



situação, garante-se que um algoritmo de optimização robusto é capaz de convergir para uma solução [Arora 2007a]. Se não existirem restrições, o domínio  $R$  corresponde a todo o espaço de  $\mathbf{x}$  e o problema é chamado de problema de optimização não-restringida ou sem restrições. Existe por vezes a ideia de que a optimização sem restrições é limitada e desadequada em termos de aplicabilidade a problemas reais, mas, na realidade, passa-se o contrário [Luenberger e Ye 2008]. Por um lado, se a abordagem a um problema for alargada de modo a contemplar todas as variáveis relevantes para a decisão, as restrições deixarão de ser necessárias. Assim, em muitos casos, as restrições funcionam como uma forma artificial de impor limitações a problemas cuja formulação não é abrangente o suficiente. Por outro lado, existem muitos problemas com restrições em que a aplicação e a resolução efectiva envolvem a sua transformação em problemas não-restringidos. Como exemplo, veja-se a utilização de restrições de igualdade. O seu efeito é limitar o número de graus de liberdade, tomando algumas variáveis como função de outras. Estas dependências podem, por vezes, ser caracterizadas explicitamente, conduzindo assim a um problema em que o número de variáveis é igual ao número real de graus de liberdade do problema<sup>1</sup>. Note-se ainda que, para além de ter significado efectivo na resolução de diversos problemas, a optimização sem restrições constitui uma base para o estudo de problemas mais gerais de optimização com restrições. Em muitos casos, teoria e algoritmos são inicialmente desenvolvidos e verificados sem restrições, antes de serem generalizados para problemas restringidos. Na prática, no entanto, muitos problemas são formulados de raiz como problemas com restrições. Isto deve-se ao facto de, na maioria dos casos, não ser possível (ou conveniente) contemplar todos os factores de influência de um problema geral, sendo mais útil a avaliação de um determinado subproblema. Assim, um dado subproblema é restringido de modo a permitir a sua resolução de forma desacoplada do problema geral. Surgem assim os problemas de programação matemática não-linear restringida, onde se enquadram os problemas abordados neste trabalho. Se todas as funções envolvidas são lineares, o problema é chamado de programação linear (PL). Se a função-objectivo é quadrática e as restrições são lineares, o problema é de programação quadrática. Diz-se que uma desigualdade  $g_j(\mathbf{x}) \leq 0$  é activa no ponto  $\mathbf{x}$  se a condição de igualdade for satisfeita nesse ponto, isto é, se o ponto  $\mathbf{x}$  for um ponto de fronteira da restrição  $g_i$ . A restrição é inactiva se tiver um valor negativo em  $\mathbf{x}$  e violada se o valor for positivo. Note-se que uma condição de igualdade é sempre ou activa ou violada num dado ponto.

Note-se ainda que alguns problemas requerem variáveis inteiras ou discretas como reflexo da sua formulação (*e.g.* selecção de propriedades tabeladas de materiais ou número de elementos estruturais). Neste caso, surge um problema de variáveis discretas ou um problema misto, com variáveis discretas e contínuas. Este resulta da modificação do problema definido na expressão 2.1, acrescentando à função-objectivo e às restrições o requisito de selecção das variáveis discretas a partir do conjunto

$$x_i \in D_i, \quad D_i = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{iq_i}); \quad i = 1, \dots, n_d, \quad (2.3)$$

onde  $n_d$  é o número de variáveis discretas,  $D_i$  o domínio dos valores admissíveis e  $q_i$  o número de valores admissíveis para a variável  $x_i$ . Este tipo de definição inclui problemas quer de variáveis inteiras quer de variáveis 0/1 (variáveis *on/off* ou binárias). Se o problema contém apenas variáveis contínuas e tanto a função-objectivo quanto as restrições são contínuas e duplamente diferenciáveis obtém-se novamente o problema geral contínuo (*vd.* Eq. 2.1). A formulação de muitos problemas de variáveis discretas, no entanto, é constituída por funções não-diferenciáveis. Este facto inibe a utilização de métodos baseados em gradientes, mas existem métodos alternativos. É também relevante salientar que a optimização de um problema de optimização com variáveis discretas requer frequentemente um esforço computacional consideravelmente superior ao de um problema de variáveis contínuas [Belegundu e Chandrupatla 1999].

<sup>1</sup>Por exemplo, uma restrição do tipo  $x_1 + x_2 = B$  pode ser eliminada substituindo  $x_2$  por  $B - x_1$  na formulação do problema.

## 2.3 Condições de Ótimo do Problema de Variáveis Contínuas

As condições de ótimo<sup>2</sup> são condições matemáticas que caracterizam o ponto ótimo de um problema. Considere-se novamente o problema de minimização da função  $f(\mathbf{x})$  (Eq. 2.1). Defina-se a existência de um mínimo local (*i.e.* mínimo relativo) no ponto  $\mathbf{x}^*$ , no domínio  $R$ , se o valor de  $f(\mathbf{x}^*)$  é mínimo numa dada vizinhança  $\delta$  de  $\mathbf{x}^*$ , isto é,

$$\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\| < \delta \Rightarrow f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}). \quad (2.4)$$

Se a desigualdade for estrita (*i.e.*  $f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$ ) então o mínimo local designa-se de estrito ou isolado. A função-objectivo tem um mínimo global ou absoluto no ponto  $\mathbf{x}^*$  se a equação 2.4 for válida para todo o domínio  $R$ , isto é, para qualquer valor de  $\delta > 0$ . Este mínimo designa-se de mínimo global estrito ou único se a desigualdade for estrita. Assim, mostra-se que um mínimo local é testado numa vizinhança limitada, ao passo que um mínimo global tem de satisfazer as condições apresentadas em todo o domínio admissível. Uma função-objectivo pode ter vários mínimos globais, desde que tenha o mesmo valor em todos eles. O mesmo se passa com os mínimos locais, na sua respectiva vizinhança. Estas definições não conduzem directamente aos mínimos (locais ou globais), mas podem ser usadas para definir condições ou critérios de ótimo que caracterizem mínimos locais. Note-se que, em contrapartida, estas definições não podem ser usadas para estabelecer condições para mínimos globais, que requerem o conhecimento do comportamento da função-objectivo em todo o domínio admissível. No caso de variáveis discretas, estas definições são particularmente úteis, visto existir apenas um número finito de pontos a analisar.

Concretamente, as condições de ótimo podem ser divididas em duas categorias: necessárias e suficientes. As primeiras têm forçosamente de ser satisfeitas para que um ponto seja candidato a mínimo da função. Os pontos que satisfazem as condições necessárias são chamados de pontos estacionários. Estes pontos não correspondem necessariamente a mínimos de  $f(\mathbf{x})$ , sendo apenas pontos óptimos se as condições suficientes forem satisfeitas. Se as condições suficientes não forem satisfeitas num ponto estacionário não é possível concluir se o ponto é ótimo ou não. Nas secções seguintes faz-se uma breve descrição das condições necessárias e suficientes, primeiro para o problema não-restringido (ou não-constrangido) e depois para o caso geral restringido. Estas são utilizadas de duas formas: (i) como base para desenvolver métodos numéricos para a procura de pontos óptimos e (ii) como ferramenta de verificação de critérios de ótimo e critérios de paragem em algoritmos iterativos [Arora 2007a].

### 2.3.1 Problema Não-Restringido

Sem restrições, o problema apresentado resume-se à minimização da função-objectivo,  $f(\mathbf{x})$ . As condições para que  $\mathbf{x}^*$  seja um ponto de mínimo de  $f(\mathbf{x})$  são obtidas a partir da análise do comportamento local da função no ponto  $\mathbf{x}^*$ , isto é, recorrendo à expansão da função com a série de Taylor [Quarteroni *et al.* 2000]. Estabelece-se a *condição necessária de primeira ordem* como: se  $\mathbf{x}^*$  é um ponto de mínimo local da função-objectivo  $f(\mathbf{x})$ , então o gradiente da função nesse ponto deve ser nulo, *i.e.*  $\partial f / \partial x_i = 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Por sua vez, a *condição necessária de segunda ordem* define-se como: se  $\mathbf{x}^*$  é um ponto de mínimo local da função-objectivo  $f(\mathbf{x})$ , então a sua matriz hessiana,

$$\mathbf{H} = \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right], \quad (2.5)$$

---

<sup>2</sup>É comum na terminologia designar as condições de ótimo como condições de optimalidade. O termo optimalidade, palavra não-dicionarizada e consagrada pelo uso na escrita científica acerca da temática de optimização, corresponde à integração do anglicismo e posterior aportuguesamento do termo inglês *optimality*.

deve ser positiva semidefinida<sup>3</sup> em  $\mathbf{x}^*$ . A *condição suficiente de segunda ordem*, por sua vez, define-se como: se a matriz hessiana  $\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)$  for positiva definida<sup>4</sup>, então o ponto estacionário  $\mathbf{x}^*$  corresponde a um mínimo local isolado da função. Qualquer ponto  $\mathbf{x}^*$  que satisfaça as condições necessárias é um ponto estacionário. Se um ponto estacionário não for um ponto de mínimo nem de máximo, então corresponde a um ponto de inflexão.

Em suma, num problema de otimização não-restringida, numa aproximação local compara-se um dado ponto com a sua vizinhança, obtendo-se um mínimo relativo ou local de uma função suave quando o gradiente se anula e a matriz hessiana é definida positiva. Estas condições são necessárias e suficientes para a obtenção de um mínimo local. Se uma função for convexa, estas condições garantem ainda que este mínimo local seja também mínimo global do problema.

Note-se ainda que as condições apresentadas baseiam-se nas derivadas de  $f(\mathbf{x})$  e não no valor da função. Assim, constatação essencial em inúmeras aplicações, o ponto mínimo não sofre alteração se uma constante for adicionada à função ou se esta for transformada por uma constante escalar. Nestes casos, altera-se apenas o valor da função no ponto ótimo. Este comportamento é de extrema importância para a normalização das funções envolvidas, como se verá ao longo deste trabalho, assim como para a utilização de alguns métodos de otimização.

### 2.3.2 Problema Restringido

Um problema de otimização pode ter um ponto ótimo sem restrições activas, o que corresponde ao problema não-restringido e às correspondentes condições de ótimo. Este cenário, no entanto, é pouco comum. As condições de ótimo do problema não-restringido são, na realidade, um caso especial das condições para o problema restringido. Estas podem ser expressas de várias formas equivalentes, sendo as mais comuns as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) [Luenberger e Ye 2008]. Para considerar estas condições é antes necessário estabelecer o conceito de ponto regular. Um ponto  $\mathbf{x}$  é um ponto regular do domínio admissível  $R$  se a função-objectivo é contínua e os gradientes de todas as restrições activas são linearmente independentes nesse ponto. O número de vectores linearmente independentes não pode ser superior ao número de variáveis  $n$ , isto é, à dimensão de cada vector. Assim, o número total de restrições activas não pode ser superior ao número de variáveis no ponto regular. Definem-se então as *condições necessárias de Karush-Kuhn-Tucker*. Seja o lagrangiano do problema  $P$  definido como

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}), \quad (2.6)$$

onde  $\boldsymbol{\lambda}$  é um vector de multiplicadores de Lagrange para as restrições  $\mathbf{g}$ . Sejam  $\mathbf{x}^*$  um ponto de mínimo local de  $f(\mathbf{x})$  e as restrições activas em  $\mathbf{x}^*$  linearmente independentes, isto é, seja  $\mathbf{x}^*$  regular. Existem então multiplicadores de Lagrange  $\lambda_i^*$  (únicos) tais que

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\lambda}^{*T} \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}, \quad (2.7)$$

$$\lambda_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = (p+1), \dots, m, \quad (2.8)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i = (p+1), \dots, m. \quad (2.9)$$

$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*)$  é uma matriz de dimensão  $n \times m$ . A equação 2.7 (condições de estacionariedade) mostra que o lagrangiano é estacionário relativamente a  $\mathbf{x}$  quando o seu gradiente é nulo. A equação 2.8 mostra que, no ponto de mínimo, ou o multiplicador de Lagrange  $\lambda_i^*$  é nulo ou a restrição  $g_i$  é activa. Esta equação define a condição de complementaridade ou folgas complementares, e identifica restrições activas e inactivas. A inequação 2.9, por sua vez, define as condições de viabilidade dual e mostra que os multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade devem ser não-negativos. Note-se que as condições de viabilidade primal correspondem às próprias restrições do problema (*vd.* Eq. 2.1). A equação 2.7 tem  $n$  variáveis e  $m$  multiplicadores de Lagrange, resultando num total de

<sup>3</sup>Uma matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diz-se semidefinida positiva se  $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$ .

<sup>4</sup>Uma matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diz-se definida positiva se  $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ .

$n + m$  incógnitas. Existem também  $n + m$  equações, com  $n$  equações na expressão 2.7,  $p$  restrições de igualdade e  $m - p$  equações na expressão 2.8. As condições necessárias KKT de primeira ordem correspondem assim a um sistema de equações, usualmente não-linear. A equação 2.7 pode ainda ser reescrita como

$$-\nabla f(\mathbf{x}^*) = \boldsymbol{\lambda}^{*T} \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^*). \quad (2.10)$$

Dado um problema de minimização sujeito a restrições de igualdade, com funções suaves, uma condição necessária no ponto ótimo é que o gradiente da função seja ortogonal ao plano tangente da superfície de restrição. Isto é equivalente a ter o gradiente da função paralelo ao gradiente da restrição. Se o ponto for regular, então o plano tangente tem uma representação simples em termos dos gradientes das funções de restrição e a condição pode ser expressa em termos de multiplicadores de Lagrange. As condições de desigualdade são processadas com a verificação de quais estão activas numa solução. Uma desigualdade activa passa a comportar-se como uma restrição de igualdade, excepto pelo facto de ser associada a um multiplicador de Lagrange que não pode ser negativo devido à interpretação de sensibilidade dos multiplicadores. Salienta-se assim o significado físico da condição de gradiente 2.10. Assim, num ponto de mínimo, a direcção de gradiente com declive máximo, ou seja, o simétrico do gradiente da função-objectivo, é paralela à combinação linear dos gradientes das restrições activas. Os multiplicadores de Lagrange são os factores escalares desta combinação linear e traduzem a influência ponderada de cada uma das restrições no processo de optimização e no ponto ótimo [Arora 2007a]. Note-se que se o ponto  $\mathbf{x}^*$  não for regular, as restantes condições KKT podem ou não ser verificadas.

Apesar de não serem utilizadas neste trabalho, pode recorrer-se ainda às condições necessárias de segunda ordem para distinguir pontos óptimos de outros pontos regulares. Estas condições recorrem a matrizes hessianas das funções. Note-se ainda que as condições necessárias para problemas convexos podem ser expressas sem derivadas, sendo neste caso denominadas condições de ordem zero.

### 2.3.3 Convexidade e Questões Adicionais

Em muitos casos, a conclusão a retirar de um processo de optimização é que o ponto ótimo encontrado é apenas um ótimo local. Um ótimo global pode ser determinado por procura exaustiva de todo o domínio admissível ou provando que o problema é convexo, sendo que ambos os procedimentos são computacionalmente exigentes. Se o problema for convexo, então um ótimo local é também um ótimo global e as condições KKT necessárias de primeira ordem são também suficientes [Arora 2007a]. Assim, um problema é convexo se a função  $f(\mathbf{x})$  for convexa no domínio admissível  $R$ . Um conjunto de pontos é dito convexo se e só se para qualquer dois pontos do domínio todo o segmento que une os dois pontos pertence também ao domínio. Verifica-se que igualdades e desigualdades lineares definem sempre um domínio admissível convexo. Igualdades não-lineares, em contrapartida, definem sempre domínios admissíveis não-convexos. Este tipo de análise, no entanto, é normalmente complexo de utilizar, pelo que são necessários métodos mais expeditos para verificar a convexidade de um domínio. Neste sentido, verifica-se que se todas as funções que definem um domínio admissível forem convexas, então este é também convexo. Por sua vez, uma função é convexa se e só se a sua matriz hessiana é pelo menos semidefinida positiva em todo o domínio. Se uma função  $g_i$  for convexa, o domínio definido por  $g_i \leq e_i$  é também convexo, para qualquer constante  $e_i$ . Note-se que esta é uma condição suficiente, mas não necessária, sendo possível uma função  $g_i$  não-convexa conduzir ainda assim a um domínio convexo [Arora 2004].

É também importante salientar que os valores óptimos dos multiplicadores de Lagrange representam a importância relativa das restrições respectivas sobre a função-objectivo. Para além disto, em aplicações práticas, é comum afectar a função-objectivo e as restrições de um factor de escala para evitar instabilidades numéricas, sendo importante verificar a sua relação com os multiplicadores de Lagrange. Considere-se um problema em que os valores-limite das restrições são zero. Seja  $e_i$  uma pequena variação no segundo termo da restrição  $g_i$ . A perturbação no ponto ótimo será

função de um vector  $\mathbf{e}$ , com  $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^*(\mathbf{e})$  e  $f = f(\mathbf{e})$ . Como resultados destas funções implícitas de  $\mathbf{e}$  surgem as derivadas implícitas  $\frac{\partial f}{\partial e_i}$  e o conceito de sensibilidade a variações nas restrições. Assim, sejam  $\mathbf{x}^*$  um ponto regular e  $\lambda_i^*$  os multiplicadores de Lagrange que satisfazem as condições de KKT necessárias e suficientes para que  $\mathbf{x}^*$  seja um ponto de mínimo. Se para cada  $g_i(\mathbf{x}) = 0$ , com  $i > p$ , se tiver  $\lambda_i^* > 0$ , então a solução do problema modificado é uma função continuamente diferenciável de  $\mathbf{e}$  numa dada vizinhança de  $\mathbf{e} = \mathbf{0}$  e

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}^*(\mathbf{0}))}{\partial e_i} = -\lambda_i^*, \quad i = 1, \dots, m. \quad (2.11)$$

Se estas condições não se verificarem, a derivada implícita expressa na equação 2.11 pode ainda assim existir, apenas não se garante a sua existência. Esta equação permite estimar o custo de uma determinada alteração no segundo termo da restrição  $i$ . O termo de primeira ordem da série de Taylor da função-objectivo no ponto  $e_i$  é dado por

$$f(e_i) = f(0) + \frac{\partial f(0)}{\partial e_i} e_i, \quad (2.12)$$

onde  $f(0)$  é o valor da função-objectivo com  $e_i = 0$ . Recorrendo à equação 2.11 pode obter-se a variação da função-objectivo,  $\Delta f$ , como

$$\Delta f = f(e_i) - f(0) = -\lambda_i^* e_i. \quad (2.13)$$

Mostra-se assim que o multiplicador de Lagrange associado a uma restrição do tipo  $\leq$  deve ser não-negativo [Arora 2007a]. Esta afirmação pode ilustrar-se relaxando uma restrição de desigualdade  $g_i \leq 0$  com  $e_i > 0$ , expandindo o domínio admissível do problema. Neste caso, o valor mínimo da função-objectivo devia reduzir-se ainda mais ou manter-se inalterado, se com a alteração a restrição deixasse de ser activa. No entanto, de acordo com a expressão 2.13, se  $\lambda_i \leq 0$  esta alteração resultaria num aumento do valor da função-objectivo ( $\Delta f > 0$ ).

A necessidade de normalizar a função-objectivo é comum em diversos problemas, procedendo-se usualmente à sua multiplicação por uma constante positiva. Apesar de esta alteração não modificar o ponto óptimo, altera os multiplicadores de Lagrange para todas as restrições. Usando as condições definidas na expressão 2.7, mostra-se que todos os multiplicadores de Lagrange são também multiplicados pelo mesmo factor. Seja  $\lambda_i^*$  o multiplicador associado à restrição  $g_i$  no problema original. Seja também a função-objectivo actualizada como  $f' = \alpha f$ , com  $\alpha > 0$ . O novo multiplicador de Lagrange da condição  $g_i$  no ponto óptimo passa a ser  $\lambda_i^{*'} = \alpha \lambda_i^*$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Na prática, é usualmente útil normalizar também todas as restrições, especialmente por se tornar complicado verificar quais as restrições mais severamente violadas sem normalização. Esta questão é particularmente relevante se as restrições envolverem a avaliação de grandezas físicas, que podem diferir de diversas ordens de grandeza e têm forçosamente de ser normalizadas para poderem ser comparadas. Esta normalização é efectuada, à semelhança do referido anteriormente para a função-objectivo, multiplicando as restrições por constantes positivas que as enquadrem numa mesma escala numérica. Estas alterações não modificam o ponto óptimo ou a função-objectivo, afectando apenas cada um dos multiplicadores de Lagrange. Recorrendo novamente à expressão 2.7 verifica-se que o multiplicador de uma restrição  $i$  é dividido pelo mesmo factor de escala. Assim, o multiplicador associado à nova restrição  $g'_i = \beta_i g_i$  no ponto óptimo é definido por  $\lambda_i^{*'} = \lambda_i^* / \beta_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ .

## 2.4 Métodos de Optimização

### 2.4.1 Conceitos Gerais

Existem inúmeros métodos de optimização, com diversas aplicações e diferentes níveis de complexidade. Cada vez mais, com a evolução da capacidade computacional, também as ferramentas e

algoritmos de optimização permitem a resolução de problemas mais complexos e de maiores dimensões. Os próprios métodos, com a crescente aplicação de metodologias de optimização, têm sido alvo de constante evolução nas últimas décadas. Nesta secção faz-se uma abordagem genérica sobre os conceitos essenciais dos algoritmos de optimização.

Os algoritmos iterativos na busca de mínimos globais e locais diferem nas suas propriedades de convergência. No primeiro caso, são questões potencialmente críticas a dependência da trajectória de convergência e a garantia da obtenção de um mínimo global a partir de um dado ponto inicial arbitrário. A verificação deste tipo de convergência é chamada de análise de convergência global. Na convergência local, analisa-se a velocidade na qual a sequência de pontos converge para a solução. Neste caso, as propriedades mais relevantes de um algoritmo prendem-se essencialmente com a sua velocidade de convergência por comparação com algoritmos alternativos. Esta comparação faz-se ainda de acordo com outras características: (i) robustez, correspondente à capacidade de um algoritmo produzir bons resultados em diferentes problemas ou configurações; (ii) eficiência, traduzida no equilíbrio entre qualidade da solução e recursos consumidos; (iii) precisão associada à solução, intimamente ligada à precisão do sistema computacional utilizado e da codificação utilizada.

Os algoritmos de gradiente são possivelmente os mais comuns em optimização, apesar de garantirem apenas a convergência para óptimos locais visto as direcções de descida se tratarem de propriedades locais e não globais [Rao 2009]. Estes algoritmos utilizam o seguinte procedimento iterativo,

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.14)$$

$k$  representa o número da iteração,  $\mathbf{x}^{(k)}$  é a estimativa de óptimo actual e  $\alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$  constitui a alteração que conduz à estimativa seguinte. Aqui,  $\alpha_k > 0$  é a dimensão do passo de actualização actual e  $\mathbf{d}^{(k)}$  a direcção de procura. O processo é iniciado numa estimativa inicial, o ponto  $\mathbf{x}^{(0)}$ .

Os algoritmos de gradiente são classificados como métodos primais e métodos de transformação [Luenberger e Ye 2008]. Nos métodos primais, a direcção que define o vector  $\mathbf{d}^{(k)}$  é calculada utilizando funções do problema e os seus gradientes no ponto  $\mathbf{x}^k$ . Diferentes algoritmos podem ser gerados com base na forma como a direcção e o passo de actualização são calculados e em muitos casos  $\mathbf{d}$  é calculado resolvendo subproblemas lineares ou quadráticos. Os métodos primais têm três vantagens significativas que tornam a sua utilização preferível numa grande parte dos problemas de programação não-linear [Luenberger e Ye 2008]. Em primeiro lugar, como cada ponto gerado pelo procedimento de busca é admissível, se o processo for terminado antes de se encontrar a solução (o que acontece quase sempre por questões práticas), o ponto final é admissível também. Assim, este ponto é válido, e provável e suficientemente próximo da solução óptima para ser considerado como solução prática efectiva. Em segundo lugar, é usualmente garantido que se se conseguir gerar uma sequência convergente, o ponto limite será pelo menos um mínimo local restringido. Finalmente, a maior vantagem é que a maioria dos métodos primais não são sustentados por uma estrutura especial do problema, como a convexidade, tornando-os aplicáveis a problemas de programação não-linear genéricos. Estes métodos, no entanto, têm também desvantagens. Para além da necessidade de se obter um ponto admissível inicial, têm dificuldades computacionais (especialmente para problemas com restrições não-lineares) inerentes à necessidade de garantir que se mantém na região admissível durante a evolução do processo. Alguns métodos podem ainda falhar na convergência com condições de desigualdade, a menos que precauções elaboradas sejam previamente tomadas.

Nos métodos de transformação, por sua vez, um problema de optimização restringido é transformado numa sequência de problemas não-restringidos. As soluções dos problemas não-restringidos convergem para a solução do problema inicial. Estes métodos incluem métodos de barreira e penalidade, incluindo ainda o lagrangiano aumentado e métodos de multiplicadores [Hestenes 1969, Arora 2004, Luenberger e Ye 2008]. Nos métodos de transformação, uma função transformada é construída adicionando um termo de penalidade às violações de restrições na função-objectivo, resultando genericamente em  $F(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + P(g(\mathbf{x}), r)$ . Aqui,  $r$  é um escalar ou um vector de parâmetros de penalidade, e  $P$  é uma função que impõe uma penalidade em função de  $r$  e das restrições. Refira-se



ainda que algoritmos robustos respondem normalmente aos seguintes quatro passos: (i) linearização da função-objectivo e restrições no ponto actual; (ii) correcta definição do subproblema de cálculo da direcção de procura; (iii) resolução deste subproblema; (iv) cálculo da dimensão do passo de actualização na direcção de procura. Os subproblemas usados para determinar a direcção de procura em cada iteração recorrem normalmente a gradientes das funções de restrição. Um subproblema que utilize gradientes apenas de um subconjunto das restrições usa uma estratégia de restrição potencial. Este subconjunto é composto por índices para restrições activas, aproximadamente activas e violadas, como, por exemplo, o conjunto de índices  $\mathbf{I}_k$  no ponto  $\mathbf{x}_k$ ,

$$\mathbf{I}_k = \left\{ i \mid i = 1, \dots, p; i > p, (g_i + \varepsilon) \geq 0 \right\}, \quad (2.15)$$

onde  $\varepsilon > 0$  é um valor reduzido utilizado para classificar desigualdades como aproximadamente activas. Note-se que as restrições de igualdade ( $i \leq p$ ) são incluídas neste subconjunto.

## 2.4.2 Métodos de Gradiente

Os métodos de gradiente são adequados para problemas de variáveis contínuas e funções diferenciáveis. Estes incluem diversas metodologias, mostrando-se nesta secção os grupos mais relevantes no contexto deste trabalho.

### 2.4.2.1 Linearização e Programação Linear Sequencial

Todos os métodos de busca começam com uma estimativa inicial do ponto óptimo, com base na qual se inicia o processo iterativo. Este processo recorre à resolução de um subproblema para melhorar a solução, obtido através da série de Taylor da função-objectivo e das restrições. Seja  $\mathbf{x}^{(k)}$  a estimativa  $k$  e  $\Delta\mathbf{x}^{(k)}$  a alteração desejada. Em vez de  $\Delta\mathbf{x}^{(k)}$ , são comumente usados uma direcção de procura  $\mathbf{d}^{(k)}$  e um tamanho de passo calculado nessa direcção para determinar a nova aproximação. O subproblema linearizado obtido, no ponto  $\mathbf{x}^{(k)}$ , pode ser escrito como

$$\min \mathbf{c}^T \mathbf{d}, \quad (2.16)$$

sujeito às igualdades linearizadas

$$(\nabla g_j)^T \mathbf{d} = e_j, \quad j = 1, \dots, p, \quad (2.17)$$

e às desigualdades linearizadas

$$(\nabla g_j)^T \mathbf{d} \leq e_j, \quad j > p \text{ e } j \in \mathbf{I}_k, \quad (2.18)$$

com  $e_j = -g_j(\mathbf{x}^{(k)})$  e  $\mathbf{c} = \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$ . Note-se que se utiliza na expressão 2.18 uma estratégia de restrição potencial. No caso de não ser utilizada, pode usar-se um valor  $\varepsilon$  muito elevado na definição do subconjunto  $\mathbf{I}_k$  (vd. Eq. 2.15).

Como as funções das equações 2.16 a 2.18 são lineares relativamente às variáveis  $d_i$ , é possível utilizar metodologias de programação linear na resolução em  $d_i$ . Estes métodos são chamados de Programação Linear Sequencial (PLS). Note-se, no entanto, que este problema pode não ter uma solução limitada. Assim, devem impor-se limites sobre as variações das variáveis. Estes são normalmente designados de limites móveis (*move limits*) e podem ser expressos como

$$-\Delta_i \leq d_i \leq \Delta_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.19)$$

onde  $\Delta_i$  traduz a variação máxima da variável  $d_i$  na iteração  $k$ . O problema continua a ser linear em  $d_i$ , pelo que metodologias de programação linear continuam a poder ser utilizadas. A correcta selecção destes limites em cada iteração, apesar de potencialmente complexa, é determinante na eficácia do algoritmo de PLS.

### 2.4.2.2 Programação Quadrática Sequencial

Os métodos de Programação Quadrática Sequencial (PQS) permitem contornar alguns inconvenientes da PLS. Neste caso, resolve-se um subproblema de programação quadrática para encontrar a direcção de procura e usa-se uma função de direcção de descida para calcular o tamanho de passo a utilizar nessa direcção. Define-se assim este subproblema como

$$\min \left[ \mathbf{c}^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} (\mathbf{d}^T \mathbf{H} \mathbf{d}) \right], \quad (2.20)$$

sujeito às restrições linearizadas 2.17 e 2.18.  $\mathbf{H}$  é uma matriz  $n \times n$  que aproxima a hessiana da função lagrangiana. Diferentes definições do subproblema de programação quadrática originam diferentes direcções de procura. Com base na direcção de procura determinada, procede-se à minimização de uma função de direcção de descida para a determinação do tamanho de passo. A função de direcção de descida, em problemas com restrições, é obtida adicionando à função-objectivo factores de penalidade para violações de restrições. Uma das propriedades das funções de direcção de descida é terem o mesmo valor da função-objectivo no ponto óptimo. Adicionalmente, o seu valor deve diminuir ao longo da direcção de procura em cada iteração, o que significa que a direcção de procura deve ser uma função de direcção de descida para a função-objectivo.

### 2.4.2.3 Métodos de Penalidade e Lagrangiano Aumentado

Existe uma classe de métodos computacionais que transformam um problema com restrições num problema não-restringido, permitindo a sua resolução como tal. Estes métodos designam-se por técnicas de minimização sequencial não-restringida. O princípio base destas técnicas consiste em combinar a dualidade do métodos de multiplicador com funções de penalidade (exterior) [Belegundu e Chandrupatla 1999]. Este termo corresponde às funções de restrição multiplicadas por parâmetros de penalidade. As penalidades vão sendo sequencialmente aumentadas e a função minimizada, até que a variação na solução seja inferior a um determinado valor de tolerância.

Os métodos de penalidade e barreira são procedimentos que aproximam problemas de optimização restringida com problemas não-restringidos. No caso dos métodos de penalidade a aproximação é obtida adicionando à função-objectivo um termo que determine um custo elevado para a violação de restrições. No caso dos métodos de barreira, adiciona-se um termo que favorece os pontos no interior da região admissível face a pontos próximos da fronteira. Associado a estes métodos surge um parâmetro  $c$  que determina o peso da penalização ou barreira, e, consequentemente, o nível de aproximação do problema não-restringido ao problema original. Enquanto a função-objectivo pode não ser localmente convexa, o problema penalizado torna-se localmente convexo para  $c$  suficientemente elevado [Luenberger e Ye 2008]. Para um problema com  $n$  variáveis e  $m$  restrições, estes métodos actuam directamente no espaço de dimensão  $n$  das variáveis (ao contrário dos primais que actuam em num espaço com dimensão  $(n - m)$ ) [Belegundu e Chandrupatla 1999, Luenberger e Ye 2008]. Nestes métodos, é importante determinar (e controlar) o nível de aproximação do problema não-restringido. É necessário verificar se com  $c \rightarrow +\infty$  a solução do problema não-restringido tende a convergir para a solução do problema original. Outra questão importante do ponto de vista prático é a forma adequada de resolver um problema não-restringido quando a sua função-objectivo contém um termo de penalidade ou de barreira. Este problema é bastante relevante, já que à medida que  $c$  aumenta, com o intuito de fornecer uma boa aproximação, o problema tende a tornar-se também menos favorável a uma correcta resolução numérica, originando problemas de instabilidade e diminuindo as taxas de convergência em diversos algoritmos.

Os métodos de penalidade e de barreira têm grande utilidade. Do ponto de vista prático fornecem formas simples de resolver problemas restringidos, que podem ser implementadas sem programação demasiado sofisticada e possuem o mesmo nível de generalidade que os métodos primais. Do ponto de vista teórico, têm a vantagem de poder condensar diversos tópicos da teoria de optimização, incluindo multiplicadores de Lagrange, condições necessárias e diversos tipos de algoritmo. Uma vantagem destes métodos é a possibilidade de utilizar algoritmos e ferramentas de optimização não-restringida em problemas com restrições. Uma das desvantagens,



no entanto, é que os parâmetros de penalidade podem tender para infinito para se obter um ótimo, criando instabilidades numéricas. De modo a contornar esta limitação surge um outro tipo de método que necessita apenas de penalidades finitas suficientemente elevadas, com os métodos de lagrangiano aumentado, designados alternativamente como métodos de multiplicador. Estes constituem uma das classes mais eficientes de métodos de programação não-linear correspondendo a uma combinação de funções de penalidade com métodos de dualidade local. Para um problema com restrições de igualdade, o lagrangiano aumentado pode ser definido como

$$\mathcal{L} = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}c \sum_{i=1}^p g_i^2(\mathbf{x}). \quad (2.21)$$

Do ponto de vista do método de penalidade, o lagrangiano aumentado, para um dado  $\lambda$ , é essencialmente a aplicação de uma função de penalidade quadrática ao problema definido no lagrangiano<sup>5</sup> da equação 2.6. Note-se ainda que, do ponto de vista complementar da teoria de dualidade, o lagrangiano aumentado é o lagrangiano da função objectivo  $f(\mathbf{x})$  (*vd.* Eq. 2.1, com  $j \leq p$ ) penalizada. Como referido anteriormente, note-se que a adição da função de penalização não altera o ponto ótimo ou os multiplicadores de Lagrange, mas tende a tornar a função convexa perto da solução, teoricamente melhorando a convergência do método dual. Esta convexidade local permite a resolução do problema através de um método iterativo em  $\lambda$ . O esquema iterativo [Luenberger e Ye 2008] inicia-se com um valor  $\lambda_k$ , para o qual  $\mathbf{x}_k$  é calculado como o ponto de mínimo da equação 2.21. De seguida,  $\lambda$  é actualizado de acordo com

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + c \mathbf{g}(\mathbf{x}(\lambda_k)). \quad (2.22)$$

Uma das vantagens do lagrangiano aumentado é o facto de condições de desigualdade serem facilmente incorporadas [Luenberger e Ye 2008]. Assim, o lagrangiano aumentado, considerando também condições de desigualdade, pode ser escrito como

$$\mathcal{L} = f(\mathbf{x}) + \left\{ \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}c \sum_{i=1}^p g_i^2(\mathbf{x}) \right\} + \left[ \frac{1}{2c} \sum_{i=p+1}^m [(\max\{0, \lambda_i + c g_i(\mathbf{x})\})^2 - \lambda^2] \right], \quad (2.23)$$

com a adição do último termo [Belegundu e Chandrupatla 1999]. Note-se que  $\lambda_i$  com  $i = 1$  a  $p$  são os multiplicadores de Lagrange para as restrições de igualdade, enquanto que para  $i > p$  são multiplicadores de Lagrange para as restrições de desigualdade. Como referido anteriormente, este método pressupõe, sequencialmente e a partir de valores iniciais para os parâmetros  $c$  e  $\lambda_i$ , a minimização da função 2.23 e a actualização dos parâmetros. O processo é repetido até que os critérios de ótimo sejam satisfeitos.

Note-se que os métodos duais são baseados na perspectiva de que são os multiplicadores de Lagrange as variáveis fundamentais associadas ao problema restringido, sendo estes que controlam o processo de convergência. Assim, os métodos duais não actuam directamente sobre os problemas restringidos originais, mas sim um problema alternativo, o problema dual, cujas variáveis são os multiplicadores de Lagrange do problema original. Num problema com  $n$  variáveis e  $p$  restrições de igualdade, os métodos duais actuam no espaço  $p$ -dimensional dos multiplicadores. Como os multiplicadores de Lagrange medem sensibilidades e têm frequentemente outras interpretações significativas (como os custos associados a recursos de restrições), a determinação dos seus valores pode ser de grande utilidade para o controlo da convergência ou a análise do comportamento do objectivo [Belegundu e Chandrupatla 1999, Luenberger e Ye 2008].

### 2.4.3 Algoritmos Alternativos

Enquanto um problema de optimização com variáveis contínuas, de domínio não-vazio, tem uma infinidade de pontos admissíveis, os problemas de variáveis discretas têm apenas um universo

<sup>5</sup>A designação de Lagrangiano Aumentado surge a partir da adição do termo de penalidade ao problema lagrangiano inicial [Belegundu e Chandrupatla 1999].

finito de potenciais soluções. No entanto, o processo de optimização pode tornar-se mais oneroso devido à ausência de condições de óptimo para orientar o processo [Arora 2004]. Nestes casos, é comum testar a definição de ponto óptimo recorrendo aos pontos disponíveis e à equação 2.4. Diversos métodos melhoram a eficiência deste processo recorrendo a abordagens estocásticas ou regras heurísticas.

Existem também diversas abordagens a problemas mistos, de variáveis discretas e contínuas. As metodologias adoptadas dependem naturalmente das características das variáveis, das funções utilizadas e do tipo de problema em análise. Note-se ainda que alguns destes métodos são utilizados em versões relaxadas de problemas de variáveis discretas (*e.g.* optimização topológica estrutural).

Os métodos de resolução de problemas envolvendo variáveis discretas podem dividir-se em dois grupos [Arora 2007a]: (i) métodos de enumeração, implícita ou explícita (*e.g.* *branch and bound algorithms*), e (ii) métodos estocásticos ou evolucionários (*e.g.* algoritmos genéticos e recozimento simulado) [Ramos e Leal 2002, Foley 2007, Vasan e Raju 2009]. A título de exemplo destacam-se os algoritmos evolucionários como um conjunto de metodologias que se têm revelado ferramentas de elevada utilidade em diversas aplicações de engenharia. Estes métodos enquadram-se nas metodologias de procura estocástica e simulam fenómenos presentes na natureza, como o comportamento de animais (*e.g.* *ant colony* ou *particle swarm*) ou princípios de selecção natural (*e.g.* algoritmos genéticos). Esta aproximação ao tipo de resposta apresentado por sistemas naturais procura obter níveis semelhantes de robustez e adaptabilidade, dando a este tipo de métodos uma grande variedade de aplicações. Os algoritmos evolucionários funcionam pela geração de populações de potenciais soluções, em detrimento de soluções individuais, orientando a seu processo de evolução no sentido do óptimo. Actualmente, a metodologia mais comum na corresponde aos algoritmos genéticos [Costa *et al.* 1999, Ramos e Leal 2002]. Neste caso, em cada iteração é gerada uma nova população (geração) por combinação das características (genes) mais favoráveis da geração anterior. Estas características, para cada indivíduo, traduzem-se na codificação (*e.g.* codificação binária) de um *array* de parâmetros (cromossoma) a serem avaliados pela função-objectivo de modo a traduzir a robustez do indivíduo. A robustez média da população é melhorada em cada geração. Uma vantagem desta metodologia é o facto de não necessitar do cálculo de derivadas das funções envolvidas. O processo é normalmente iniciado com um conjunto de pontos gerados aleatoriamente, correspondentes a uma população de indivíduos com diferentes códigos genéticos (*i.e.* *arrays* de parâmetros). Estes são avaliados de acordo com a sua robustez, escolhendo-se os indivíduos cuja qualidade genética deve influenciar a geração seguinte. A nova geração nasce pela manutenção de indivíduos de robustez elevada e da actuação de operadores específicos do método. Qualquer implementação de algoritmos genéticos tem pelo menos os operadores de (i) cruzamento ou reprodução e (ii) mutação [Ramos e Leal 2002]. No cruzamento ou reprodução, os indivíduos seleccionados trocam parte do seu código genético, com uma probabilidade variável de acordo com a imposição de alguma aleatoriedade e a robustez de cada indivíduo envolvido. Note-se que esta troca pode ser efectuada de diversas formas, dependendo da implementação e do problema em análise. A mutação, por sua vez, consiste na alteração aleatória de um ou mais genes de um cromossoma, e é utilizada com probabilidades normalmente baixas. A evolução do processo geral leva à progressiva eliminação dos indivíduos mais fracos. A mutação, contudo, permite forçar o surgimento de pontos diferentes no domínio admissível, levando à exploração de diferentes alternativas. O algoritmo tem um critério de paragem associado, de modo a que seja considerada como última geração aquela a partir da qual já não se conseguem melhorias de robustez ou o cujo número corresponda a um limite predefinido. Considera-se como óptimo o indivíduo mais robusto desta última geração. Refira-se que uma das principais complexidades deste método assenta no equilíbrio entre o número de indivíduos da população, o número e a complexidade das variáveis cuja codificação conduz ao código genético analisado, e o esforço computacional exigido pela avaliação de cada indivíduo.

Salienta-se ainda o facto de, em algumas aplicações, ser necessário encontrar a solução global de um problema de optimização em detrimento de soluções locais. Exceptuando-se o caso de problemas convexos, não existem condições matemáticas que permitam determinar se um óptimo local

é também um ótimo global. Definir um correcto critério de paragem para um algoritmo de optimização global torna-se assim uma tarefa complexa. Normalmente aceita-se como ótimo global a melhor solução obtida depois de se executar um algoritmo um número de iterações suficiente. Note-se que o esforço computacional associado a esta estratégia aumenta de forma evidente com o número de variáveis, pelo que a eficiência de um processo de optimização global é um factor de extrema importância. Refira-se de antemão que, em problemas não-diferenciáveis e problemas com variáveis discretas ou mistas, os métodos estocásticos ou evolucionários referidos anteriormente podem ser utilizados com sucesso numa grande variedade de problemas. Uma das suas vantagens assenta na possibilidade de procura por todo o domínio admissível [Alba *et al.* 2009]. Em termos gerais, os métodos de optimização global são tipicamente métodos determinísticos, de busca exaustiva do domínio admissível ou métodos estocásticos, que, por definição, dependem essencialmente de processos aleatórios para a procura de ótimos globais [Arora 2007a].

#### 2.4.4 Optimização Multiobjective

A optimização simultânea de múltiplas funções-objectivo é comum em diversas aplicações práticas, conduzindo a metodologias multiobjective<sup>6</sup>. Estes problemas são normalmente transformados num problema com uma única função-objectivo por combinação linear das funções individuais das funções-objectivo. Abordando novamente um problema geral de minimização, agora como um problema multiobjective, define-se o vector de funções-objectivo

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})\}, \quad (2.24)$$

composto por  $k$  funções-objectivo. Em problemas de optimização com um único objectivo, os métodos utilizados fornecem mínimos locais para a função-objectivo no domínio admissível  $R$ . Se todos os mínimos locais forem encontrados, torna-se possível identificar um mínimo global. Em optimização multiobjective, o problema torna-se mais complexo e conduz normalmente a mais que uma solução. Na realidade, dificilmente um ponto ótimo  $\mathbf{x}^*$  corresponde à minimização de todas as funções-objectivo, criando alguma ambiguidade no conceito de optimização multiobjective [Turevsky e Suresh 2011]. Como as diferentes funções conduzem frequentemente a conflitos e a soluções de compromisso, pode existir uma infinidade de pontos ótimos, conduzindo ao conceito de Ótimo de Pareto<sup>7</sup> [Grierson 2008]. Define-se então um ponto  $\mathbf{x}^*$  como um sendo ótimo de Pareto se e só se não existir outro ponto  $\mathbf{x} \in R$  tal que  $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$  com pelo menos uma função  $f_i(\mathbf{x}) < f_i(\mathbf{x}^*)$ , *i.e.* se nenhum ponto permitir a redução do valor de uma função-objectivo sem aumentar outra. Um vector de funções-objectivo  $\mathbf{f}^\circ$  é denominado de ponto ideal ou utópico se cada  $f_i^\circ$  for ótimo da função-objectivo  $f_i$ . O ponto ideal é um ponto único no espaço de critérios, obtido pela minimização isolada de cada função-objectivo. Cada minimização resulta num ponto do espaço admissível de variáveis e num valor da função-objectivo correspondente. Note-se que este ponto é normalmente existente apenas no espaço de critérios e não no espaço de variáveis, já que dificilmente a minimização isolada das funções objectivo conduz ao mesmo ponto neste espaço. Por esta razão, o ponto escolhido como ótimo corresponde a uma solução de compromisso, seleccionado segundo um critério escolhido *a priori*. Estes conceitos são ilustrados na figura 2.1.

Os problemas multiobjective têm uma infinidade de soluções, correspondentes a regiões ótimas de Pareto (*e.g.* com duas funções-objectivo obtém-se uma curva bidimensional de Pareto). Neste sentido, pode ser necessário calcular toda a região ótima de Pareto ou uma parte representativa da mesma. Esta região é normalmente obtida por variação de parâmetros de controlo, utilizados de forma a que as diversas funções-objectivo sejam uma contribuição para uma função-objectivo

<sup>6</sup>É também comum classificar metodologias multiobjective como multicritério ou problemas de optimização vectorial.

<sup>7</sup>O conceito de ótimo ou eficiência de Pareto surge inicialmente no domínio da economia, com os estudos de Vilfredo Pareto sobre a utilidade simultânea de diferentes agentes económicos. Neste sentido, Pareto refere a impossibilidade de, em pontos de equilíbrio, incrementar a utilidade de uma entidade sem prejudicar outra [Pareto 1896].

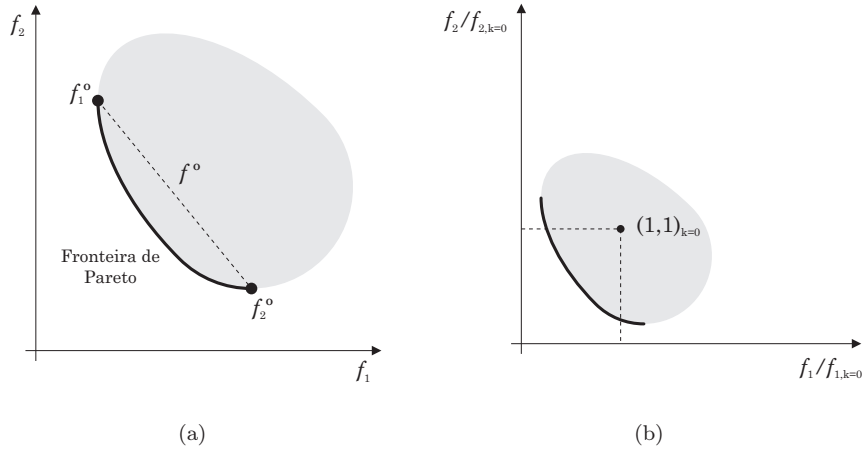


Figura 2.1: Representação esquemática (a) da fronteira de Pareto e linha de utopia ( $f^o$ ) e (b) normalização das funções-objectivo.

global escalar. Refira-se ainda que os diferentes métodos utilizados podem permitir o cálculo de regiões incompletas ou completas de Pareto, podendo, neste último caso, resultar em óptimos não-Pareto [Messac e Mullur 2007].

A abordagem mais comum a esta questão corresponde a uma metodologia de soma ponderada das diversas funções-objectivo. Cada função-objectivo  $f_i$  é ponderada com um factor de peso  $w_i > 0$ , resultando na função-objectivo composta

$$F = \sum_{i=1}^k w_i f_i(\mathbf{x}). \quad (2.25)$$

As funções-objectivo são usualmente normalizadas antes de serem ponderadas, especialmente se traduzirem grandezas físicas diferentes. Os pesos devem traduzir a importância relativa dos diferentes objectivos envolvidos, mas podem ser manipulados de diferentes formas. Por um lado, a sua definição pode depender do utilizador (ou programador), de modo a traduzir a ponderação pretendida. Por outro lado, podem ser sistematicamente variados no sentido de obter diferentes óptimos e consequentemente se poder construir regiões óptimas de Pareto. Note-se que existem diversas variações desta metodologia, nomeadamente minimizando o desvio entre as soluções e os pontos de utopia.

## 2.5 Optimização em Cálculo Estrutural

Nas suas variadas formas, especialmente em termos empíricos, a optimização estrutural (*Structural Optimisation* – SO) é uma temática antiga em engenharia. Esta designa usualmente a optimização de estruturas em engenharia com vista a obter o melhor compromisso entre características como rigidez, peso ou custo. No entanto, a primeira abordagem orientada para uma avaliação científica de problemas de optimização estrutural é atribuída a Maxwell [Maxwell 1870] e posteriormente a Michell [Michell 1904]. Numa abordagem essencialmente associada a problemas de engenharia civil, Maxwell estudou formas de projectar uma ponte utilizando o mínimo de material. Assim, recorreu a conceitos de teoria de elasticidade para estudar a distribuição ideal de material num domínio infinito, sujeito a carregamentos e apoios. Com base na análise dos campos de tensões obtidos, Maxwell sugeriu que uma estrutura óptima seria constituída por elementos discretos tipo

barra (estruturas articuladas) orientados segundo as direcções principais do campo de tensões obtido. Nestas direcções, os elementos estariam sujeitos apenas a tensões normais, sem componentes de corte. Esta abordagem foi mais tarde retomada por Michell, aplicada à obtenção de estruturas óptimas com minimização de material. Um exemplo deste tipo de estrutura pode ver-se na figura 2.2 [Michell 1904, Rozvany 1998], neste caso para uma viga encastrada e um carregamento pontual (Michell-*cantilever*). Estas estruturas são frequentemente utilizadas como *benchmarks* analíticos para optimização topológica de estruturas reticuladas ou limites teóricos para problemas de optimização topológica bidimensionais quando o volume tende para 0 [Rozvany 1998].

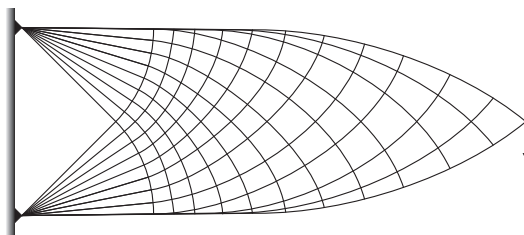


Figura 2.2: Exemplo de estrutura reticulada de Michell (Michell-*cantilever*).

Estes resultados, essencialmente por questões práticas de fabrico, foram considerados demasiado académicos e apenas abordados de novo mais tarde [Silva 2010]. A análise computacional do comportamento estrutural surge a partir dos anos 1960 [Schmit 1960], com o crescimento do Método dos Elementos Finitos (MEF) [Zienkiewicz e Taylor 1989]. Inicialmente as aplicações incidiam sobre estruturas discretas, essencialmente articuladas, actuando sobre as secções transversais dos elementos. As variáveis utilizadas foram gradualmente generalizadas para parâmetros geométricos de vigas ou placas, mantendo a vantagem de poderem ser manipuladas sem influenciar a malha inicial de elementos finitos (*ground structure*). Numa fase inicial mais ligada à indústria aeronáutica, surgem mais tarde diversos algoritmos de optimização com aplicações cada vez mais abrangentes. Na década de 80, com a evolução de sistemas computacionais e o surgimento de programas comerciais de simulação numérica, as ferramentas de optimização tornam-se mais comuns e, nas suas diversas formas, são aplicadas em inúmeras áreas científicas e de engenharia. O foco da optimização estrutural foi gradualmente actuando também sobre a forma (geometria) ou topologia das estruturas, exigindo reconfiguração da malha ou alteração das porções efectivamente disponíveis de material. Esta migração acarretou também a necessidade de lidar com um número normalmente muito elevado de variáveis de optimização, associado a um custo computacional muito elevado de cada avaliação das funções-objectivo.

Note-se ainda que grande parte dos problemas de optimização estrutural são formulados como problemas contínuos, mas existe também um elevado interesse em optimização de variáveis discretas. Estas tendem a dividir-se em duas categorias: aquelas que são efectivamente contínuas, mas disponíveis em conjuntos limitados (*e.g.* aplicações em engenharia civil, com elementos estruturais normalizados); aquelas cuja definição inicial é discreta (*e.g.* distribuição topológica de material) [Haftka e Sobieszczanski-Sobieski 2001].

### 2.5.1 Tipos de Optimização Estrutural

De acordo com o que se referiu anteriormente, é comum dividir a optimização estrutural em três abordagens fundamentais: optimização dimensional ou paramétrica, optimização topológica e optimização de forma [Silva 2010]. Na figura 2.3 mostra-se uma ilustração geral destes tipos de optimização.

Na optimização paramétrica ou dimensional, as variáveis de projecto são parâmetros relevantes em termos do comportamento de uma estrutura. Tipicamente, estes são parâmetros de definição

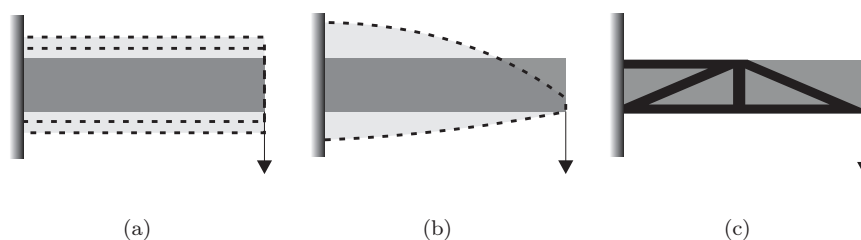


Figura 2.3: Representação esquemática das abordagens comuns em optimização estrutural: (a) optimização paramétrica, (b) optimização de forma e (c) optimização topológica.

de secção transversal, dimensões isoladas, parâmetros constitutivos, *etc.* Neste sentido, a optimização paramétrica mistura-se muitas vezes com a optimização de forma. A optimização de forma permite alterar a geometria de uma estrutura de modo a se obter a configuração óptima. As variáveis de projecto são normalmente coordenadas de pontos relevantes ou parâmetros de definição geométrica. Actualmente, uma das abordagens mais comuns, especialmente quando complementadas com algoritmos de geração de malha, é a manipulação de coeficientes de curvas representativas da geometria de uma peça (e.g. *splines* ou NURBS<sup>8</sup>). Na optimização topológica, por sua vez, a função-objectivo é optimizada manipulando a topologia da estrutura dentro de um domínio possível. Essencialmente, este tipo de optimização estrutural corresponde a distribuir o material no interior do domínio de modo a responder da melhor forma à função que se quer maximizar e às diversas restrições associadas. As variáveis utilizadas, variáveis de densidade ou magnitude das propriedades em análise, permitem oscilar entre diferentes fases de material ou simplesmente vazio. A temática da optimização topológica é um dos pontos essenciais deste trabalho, pelo que será retomada em detalhe no decorrer deste documento.

---

<sup>8</sup>As NURBS, *Non-Uniform Rational Basis Spline*, resultam de um modelo matemático usado habitualmente em gráficos gerados por computador que permite a representação de curvas e superfícies com grande flexibilidade e precisão, e são uma generalização não-uniforme de curvas Bézier.

## Capítulo 3

# Conceitos Gerais de Cálculo Paralelo

*Descrevem-se alguns conceitos relevantes em computação paralela e distribuída. Resumem-se as principais arquitecturas de computação, procedimentos de programação e análise de desempenho.*

---

### 3.1 Introdução

A necessidade de sistemas de computação paralela prende-se com a resolução de aplicações com requisitos de grande capacidade de processamento, seja pelo volume de dados seja pela complexidade dos problemas associados. Muitos problemas de engenharia, especialmente no que diz respeito à simulação numérica, são de tal forma exigentes em termos de recursos que a utilização de apenas uma máquina convencional se torna inviável.

Em termos genéricos, a computação paralela pode ser definida como sendo a resolução mais rápida de uma tarefa, recorrendo à utilização simultânea de múltiplos processadores [Leopold 2001], que comunicam e cooperam para a redução dos tempos de processamento [Almasi e Gottlieb 1994]. Estes sistemas podem ser classificados segundo diferentes arquitecturas e a comunicação efectuada segundo diferentes protocolos. O processamento e a sua avaliação, por sua vez, obedecem a certos conceitos e parâmetros, como é exposto nas secções que se seguem.

Desde o primeiro computador digital electrónico de aplicação geral que podem ser identificadas cinco gerações distintas de *hardware*: tubos de vácuo (1939–1950), díodos e transístores (1950–1960), circuitos integrados em pequena, média e grande escala – SSI (*Small-Scale Integration*), MSI (*Medium-Scale Integration*) e LSI (*Large-Scale Integration*) – (1960–1970), circuitos integrados em muito alta escala – VLSI (*Very-Large-Scale Integration*) – (1970–1990) e ultraescala – VLSI (*Ultra-Large-Scale Integration*) – (1990–\*) [Noor 1997]. Destaca-se o surgimento dos circuitos VLSI, trazendo formatos mais compactos e conduzindo simultaneamente a maior complexidade e à redução de custos. Este foi um factor determinante no desenvolvimento de sistemas computacionais, quer no que diz respeito a arquitecturas de computação paralela quer a máquinas de von Neumann (*vd.* Sec. 3.2.1) [Palin 2007].

Note-se que também a evolução das redes de comunicação possibilita um aumento da eficiência e fiabilidade das ligações entre computadores, trazendo grandes benefícios no desenvolvimento de sistemas paralelos e distribuídos. Assim, outros autores [Grama *et al.* 2003] fazem a divisão cronológica da evolução dos sistemas computacionais da seguinte forma: *batch era*, processamento



em lotes de cartões perfurados; *time-sharing era*, com a possibilidade de mais que um utilizador utilizar um dado computador; *desktop era*, com a democratização dos computadores pessoais; a *network era*, com a evolução da comunicação em rede e consequente influência nos paradigmas de processamento e cooperação.

É ainda comum a divisão histórica do processamento segundo duas fases: de processamento sequencial e de processamento paralelo [Palin 2007]. Em qualquer caso, a sequência de evolução em termos de computação começa no desenvolvimento de arquitecturas físicas, seguido do desenvolvimento de *software* de sistema (especialmente compiladores e sistemas operativos). Surgem depois as aplicações e atinge-se o ponto de saturação com o seu crescimento na aplicação em sistemas e plataformas dedicadas de resolução de problemas. Por sua vez, todos estes sistemas passam por 3 fases: I&D, comercialização e chegada a produto de consumo geral (*commodity*). Note-se que, independentemente dos critérios utilizados, todas as análises da evolução dos sistemas computacionais convergem na tendência para obter elevados desempenhos e capacidade de processamento recorrendo a agregados de unidades de processamento com algum tipo de processamento cooperativo via rede.

Salienta-se o facto de existir ainda alguma ambiguidade na utilização de designações como computação paralela, distribuída ou concorrente, especialmente no caso dos dois primeiros. Um dado sistema pode ser simultaneamente classificado de paralelo e distribuído, dependendo da abordagem ou do paradigma de programação e desenvolvimento utilizado. Neste trabalho, o termo paralelo é assumido como a forma mais interactiva e dependente de processos de um sistema distribuído, onde existe comunicação entre os fluxos de tarefas durante a sua execução. Um sistema distribuído será, em termos genéricos, um sistema em que os diferentes processos paralelos são executados de forma independente, contribuindo, no final de um dado fluxo de instruções, com a sua parte para a resolução de um problema global. O termo concorrente é genericamente aplicado a processos que sejam executados em simultâneo.

Em termos de computação científica, o cálculo paralelo vai gradualmente assumindo um papel de crescente importância. Ao mesmo tempo que os modelos utilizados vão evoluindo, tornando-se mais sofisticados e detalhados, os tempos de execução tendem muitas vezes a aumentar também, apesar dos avanços na tecnologia de *hardware* [Rajan *et al.* 2004]. Note-se, no entanto, que os avanços têm ocorrido também ao nível do poder de computação em termos de algoritmia. À medida que o *hardware* foi evoluindo, também evoluiu o potencial para o desenvolvimento de estratégias e algoritmos de cálculo mais eficientes [Houstis e Rice 2000]. Todos estes avanços são ainda acompanhados pelo desenvolvimento de sistemas operativos, ferramentas de gestão e compiladores, contribuindo em conjunto para o crescimento dos recursos efectivos disponíveis para computação. Tudo isto contribuiu, em métodos computacionais em engenharia, para permitir a resolução de problemas de elevada dimensão, quer pelo número de graus de liberdade quer, por exemplo, em optimização, pelo número de variáveis de projecto envolvidas [Oden 2003]. Todos estes avanços, no entanto, não garantem o melhor desempenho dos métodos de resolução dos problemas. O desempenho de uma análise pelo método dos elementos finitos, por exemplo, é função de diversos factores: (i) a possibilidade e a eficiência de partição do problema em subdomínios; (ii) a estrutura de dados e algoritmos; (iii) a eficiência dos algoritmos utilizados no processamento de matrizes esparsas; (iv) a eficiência dos métodos de resolução iterativos; (v) a eficiência dos algoritmos utilizados ao nível das comunicações, especialmente com o aumento do número de subdomínios envolvidos [Rajan *et al.* 2004]. Estas limitações, juntamente com alguma inércia na exploração do potencial computacional actualmente disponível [Oden 2003], leva a que o número de trabalhos de métodos computacionais em engenharia utilizando explicitamente cálculo paralelo sejam comparativamente poucos. No entanto, nas últimas décadas, diversos autores têm investido no desenvolvimento de códigos e aplicações com cálculo paralelo em diversas áreas [Kayvantash e Thierauf 1991, Storaasli *et al.* 1993, Brown *et al.* 2000, Sonzogni *et al.* 2002, Yoshimura *et al.* 2002, Har e Fulton 2003, Rus *et al.* 2003, Tai e Zhao 2003, Chung *et al.* 2006, Tezduyar e Sameh 2006]. Em particular, em optimização estrutural, desde os anos 80/90 que alguns autores recorrem ao cálculo paralelo na resolução de problemas [Sikiotis e Saouma 1988, El-Sayed e Hsiung 1991, Xicheng e Guixu 1992, Hsiung e



El-Sayed 1993]. Na última década, surgem ainda aplicações de optimização topológica em cálculo paralelo, para problemas de elevadas dimensões [Borrval 2001, Kim *et al.* 2004, Vemaganti e Lawrence 2005, Mahdavi *et al.* 2006, Evgrafov *et al.* 2008, Wuppalapati *et al.* 2008, Coelho *et al.* 2011a].

## 3.2 Conceitos Gerais

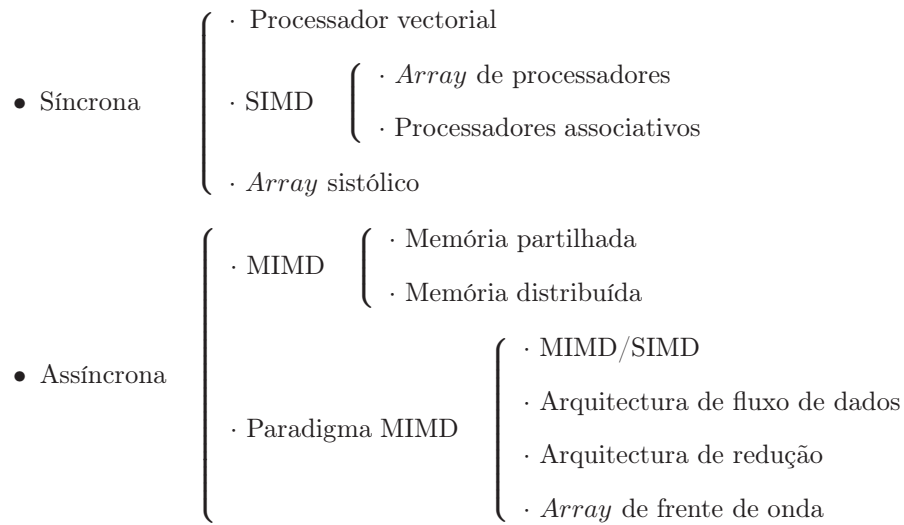
### 3.2.1 Arquitecturas e Redes em Computação Paralela

As diferentes arquitecturas de computação paralela podem ser classificadas de acordo com diferentes aspectos. Destacam-se, por exemplo, o modelo de controlo, o tipo de processador, o modelo de memória ou a topologia da rede de comunicações. No entanto, a enorme diversidade de arquitecturas existentes impossibilita uma classificação universal, pelo que várias taxinomias têm vindo a ser propostas [Feng 1972, Shore 1973, Händler 1977, Hwang e Briggs 1984, Basu 1987, Hockney 1987, Johnson 1988, Snyder 1988, Skillicorn 1988, Duncan 1990, Dasgupta *et al.* 1990, Krishnamurthy 1990, Martin *et al.* 1991, Almasi e Gottlieb 1994]. A taxonomia mais difundida foi desenvolvida em 1966 por Flynn [Flynn 1966, Flynn 1972]. De acordo com este autor, as arquitecturas computacionais classificam-se com base na relação existente entre fluxos de dados e fluxos de instruções<sup>1</sup>. Desta classificação resultam as seguintes categorias: *Single Instruction stream/Single Data stream* (SISD), *Single Instruction stream/Multiple Data streams* (SIMD), *Multiple Instruction streams/Single Data stream* (MISD) e *Multiple Instruction streams/Multiple Data streams* (MIMD). A categoria SISD corresponde, normalmente, a computadores sequenciais de um processador (máquina de von Neumann). Neste caso, um único fluxo de instruções é executado sequencialmente sobre um único fluxo de dados. Existem, no entanto, sistemas SISD paralelos [Hlavička 1997]. Por sua vez, nos computadores paralelos SIMD, várias unidades de processamento (UP) executam um dado fluxo de instruções sobre diferentes fluxos de dados. Estas instruções são executadas de modo sincronizado, de acordo com uma única unidade de controlo (UC). Com muito poucos exemplos existentes, os computadores MISD são compostos por múltiplos processadores que executam diferentes fluxos de instruções sobre um único fluxo de dados. A maioria dos computadores paralelos actuais (*e.g.* os *clusters*) pertencem, no entanto, à categoria MIMD. Neste caso, os sistemas de computação paralela são constituídos por múltiplos processadores que executam, de forma independente, diferentes fluxos de instruções sobre diferentes fluxos de dados.

A taxonomia de Flynn, no entanto, apresenta algumas limitações, especialmente pelo facto de não ser abrangente o suficiente para incluir alguns dos tipos de computador moderno. Essencialmente, o problema advém do facto de existirem arquitecturas cujo controlo não se baseia exclusivamente no modelo feito por uma sequência de instruções, segundo o modelo de von Neumann. Para além de classes que não são abrangidas pela taxonomia de Flynn, este modelo também se torna demasiado limitativo ao não hierarquizar as diferentes arquitecturas de cada classe. Atendendo a tudo isto, surge a taxonomia de Duncan [Duncan 1990] como modelo mais abrangente para a classificação de arquitecturas paralelas [Pinho-da-Cruz 2007]. Por um lado, a taxonomia de Duncan exclui as arquitecturas em que o paralelismo se baseie exclusivamente em mecanismos de baixo nível (*e.g.* *pipelining*<sup>2</sup> de instruções), essencialmente pelo facto de ser um mecanismo de paralelismo comum à maioria dos computadores actuais. Adicionalmente, mantêm-se as principais classes de Flynn — SIMD e MIMD —. Assim, a taxonomia de Duncan pode resumir-se da seguinte forma [Pinho-da-Cruz 2007]:

<sup>1</sup>O fluxo de instruções é a “sequência de instruções executadas pela máquina” e o fluxo de dados é a “sequência de dados utilizada pelo fluxo de instruções” [Flynn 1966].

<sup>2</sup>*Pipelining* é uma técnica em que se sobrepõe a execução de várias instruções. Enquanto que num processo sem *pipeline* uma instrução é executada apenas após se completar a anterior, num processo com *pipeline* uma instrução é dividida em etapas, começando uma instrução a ser executada logo que se complete a primeira etapa da instrução anterior, resultando assim numa diminuição do tempo de execução necessário.



Distinguindo as principais classes, refira-se que numa máquina paralela síncrona os processadores executam, com base num relógio global, a mesma instrução em simultâneo. Esta categoria subdivide-se em processador vectorial [Hintz e Tate 1972, Watson 1972], máquina SIMD [Thurber e Wald 1975, Yau e Fung 1977, Hwang e Briggs 1984] e *array* sistólico [Kung e Leiserson 1979]. Em contrapartida, nas arquitecturas assíncronas os vários processadores executam, num determinado instante, diferentes instruções. Esta categoria é constituída pelas arquitecturas MIMD e paradigma MIMD. A classe MIMD coincide com a arquitectura homónima de Flynn, *i.e.* computadores com múltiplos processadores que executam, simultânea e independentemente, diferentes fluxos de instruções sobre distintos fluxos de dados. O paradigma MIMD consiste numa classe de máquinas que, embora funcionem de modo assíncrono com múltiplos fluxos de instruções e dados (MIMD), apresentam modelos de controlo de execução que não se baseiam no fluxo de instruções. Esta classe subdivide-se nas arquitecturas MIMD/SIMD [Lipovski e Malek 1987], de fluxo de dados [Treleaven *et al.* 1982, Watson e Gurd 1982], de redução [Treleaven *et al.* 1982] e no *array* de frente de onda [Kung *et al.* 1987].

Um outro ponto-chave em processamento paralelo diz respeito às redes que permitem a comunicação entre os diferentes processos. A topologia destas redes, assim como a sua gestão, determina a forma e a eficiência das ligações entre os nós. Algumas das noções utilizadas na caracterização das topologias de rede consistem no grau de um nó, na distância entre nós e no diâmetro da rede. Dois nós dizem-se vizinhos se existe uma ligação directa entre eles, ou seja, se existir uma ligação sem nós intermédios. O grau de um determinado nó corresponde ao número de vizinhos que este possui. A distância entre dois nós corresponde ao número de ligações que definem o caminho mais curto que os une. A distância máxima entre dois nós quaisquer define o diâmetro da rede. Adicionalmente, convém definir a conectividade de uma topologia, correspondente à razão entre o número de ligações e o número de nós. A largura de banda<sup>3</sup>, por sua vez, corresponde à taxa máxima de transferência de informação através da rede de interligação [Hennessy e Patterson 2002].

As redes de interligação podem ser estáticas ou dinâmicas. As redes estáticas mantêm a configuração das suas ligações invariante durante a execução de um programa. Por outro lado, as redes dinâmicas não possuem uma topologia fixa, adaptando-se dinamicamente de acordo com as necessidades de transferência de dados [Pinho-da-Cruz 2007]. As topologias de rede estática mais comuns em sistemas paralelos são em anel, em anel cordal, de malha totalmente ligada, em estrela, de malha bidimensional e de hipercubo. Estas encontram-se representadas esquematicamente na figura 3.4. Pode verificar-se que o grau de nó pode ser constante, como, por exemplo, no caso da rede em anel, ou variar de acordo com o número de nós da rede, como é o caso da topologia de rede em estrela. Cada ligação efectuada por um nó necessita da existência de uma porta,

<sup>3</sup>Do inglês: *bandwidth*.

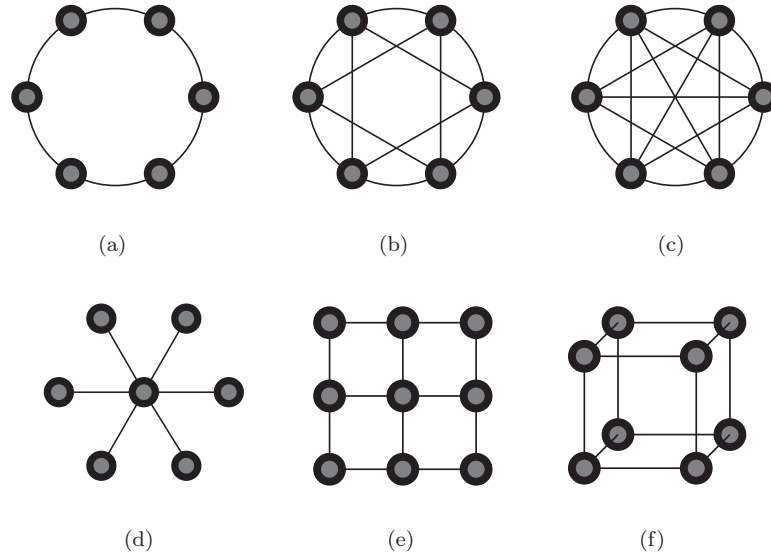


Figura 3.1: Representação esquemática das topologias mais comuns de rede estática: (a) em anel, (b) em anel cordal, (c) de malha totalmente ligada, (d) em estrela, (e) de malha bidimensional e (f) de hipercubo.

pelo que as redes com graus de nó mais reduzidos se tornam menos dispendiosas economicamente. Adicionalmente, a escolha de topologia deve ser coerente com o padrão de comunicações utilizado no sistema de computação paralela em causa. Em condições ideais, o grau de uma rede estática seria igual a  $N - 1$  graus de nó, sendo  $N$  o número total de nós, e o diâmetro igual a 1. As diferentes topologias oferecem diferentes compromissos entre estes factores. No extremo inferior em termos de conectividade, aparece a rede de anel, com uma conectividade reduzida. Neste caso, além de um grau de nó constante (e igual a 2), tem um diâmetro que aumenta proporcionalmente ao número de nós, podendo, atendendo ao reduzido número de caminhos redundantes, originar problemas de comunicação no caso de falhas em algum dos ramos de comunicação. A inclusão de caminhos redundantes tende para a criação de um anel cordal e, no limite, de malha totalmente ligada. Neste caso, apesar da complexidade e custos elevados, a conectividade aumenta com o número de nós e o diâmetro é sempre mínimo. A topologia de hipercubo acaba por ser um bom compromisso entre as topologias de anel e totalmente ligada. Neste caso, o diâmetro de rede e o grau de nó crescem logaritmicamente com o número de nós. Estas três redes apresentam simetria nodal, o que significa que a rede é vista de igual modo por qualquer dos nós. Assim, não existem nós privilegiados, que tendem a propiciar estrangulamentos de comunicação. Um exemplo de nó privilegiado é o nó central da rede em estrela [Pinho-da-Cruz 2007].

No que diz respeito às redes dinâmicas, estas consistem, em termos gerais, no barramento (*bus*) partilhado ou em sistemas de interligação centrais cuja estrutura é configurável por meio de múltiplos comutadores que permitem estabelecer ligações entre quaisquer nós [Hennessy e Patterson 2002]. As redes dinâmicas *crossbar switch* e *multistage switch* (multietapa) constituem dois exemplos de sistemas de interligação centralizados [Pinho-da-Cruz 2007]. No barramento partilhado, ilustrado na figura 3.2(a), onde P representa uma unidade de processamento e M representa uma unidade de memória, a comunicação pode ser feita directamente entre dois nós, sendo o diâmetro de rede igual a 1. Uma das grandes limitações deste tipo de rede surge pelo facto de não ser possível haver comunicações simultâneas para diferentes pares de nós, sendo necessário que o acesso de um nó emissor à rede seja exclusivo deste, o que pode elevar ao estrangulamento das

comunicações [Murdocca e Heuring 2000, Hennessey e Patterson 2002]. A este fenómeno, em que dois nós concorrem para o acesso ao barramento dá-se o nome de contenção e leva à diminuição da largura de banda efectiva disponível para cada nó [Murdocca e Heuring 2000]. Outra limitação deste tipo de rede é a falta de caminhos redundantes, existindo apenas um caminho de comunicação. No caso de este falhar, o resultado é o bloqueio total do sistema. Ainda assim, devido ao seu baixo custo, este tipo de rede é bastante utilizado, especialmente em sistemas com um número reduzido de nós [Pinho-da-Cruz 2007]. Estas limitações podem, no entanto, ser contornadas com o recurso a um sistema de barramento múltiplo, constituído por vários barramentos dispostos em paralelo [Tabak 1990] (*vd.* Fig. 3.2b). Este permite obter valores superiores de largura de banda e redundância em caso de falha.

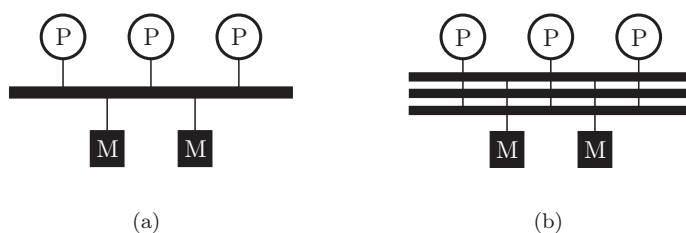


Figura 3.2: Representação esquemática dos barramentos (a) partilhado e (b) múltiplo.

A rede dinâmica *crossbar switch* é essencialmente uma malha de interruptores. Esta malha permite a comunicação entre quaisquer dois nós (desde que não se encontrem já ocupados) sem que haja redução da largura de banda. Mais uma vez, devido à comunicação directa entre dois nós, o diâmetro deste tipo de rede é igual a 1 [Murdocca e Heuring 2000]. No entanto, apesar do elevado desempenho, o seu elevado custo limita a sua utilização generalizada em máquinas paralelas. Neste aspecto, as redes de interligação multietapa apresentam-se como soluções mais viáveis, sendo menos dispendiosas que as redes *crossbar switch*, permitindo que se obtenham melhores desempenhos na comunicação devido à sua simplicidade de comutação [Pinho-da-Cruz 2007]. Estas redes são constituídas por vários comutadores simples de  $k$  entradas e  $k$  saídas, e podem ser classificadas como bloqueantes, não-bloqueantes ou reconfiguráveis. Uma rede diz-se bloqueante se existe pelo menos uma ligação entre os nós que não pode ser efectuada. Numa rede não-bloqueante todas as ligações entre os nós podem ser efectuadas sem que seja necessário alterar as restantes ligações. Por fim, numa rede reconfigurável todas as ligações entre os nós são possíveis, sendo porém necessário em algumas situações alterar-se parte das restantes ligações.

Note-se que, à excepção da topologia de malha totalmente ligada ou dos sistemas baseados num meio partilhado (*e.g.* barramento), as redes de interligação não permitem que todos os nós comuniquem de modo directo, havendo a necessidade de conduzir correctamente os dados entre nós. Para o efeito, existem técnicas específicas de encaminhamento<sup>4</sup> e de comutação<sup>5</sup> de mensagens. As técnicas de encaminhamento são responsáveis pela forma como uma mensagem deve ser transportada de um nó emissor até a um nó receptor. As técnicas de comutação definem a transmissão de mensagens entre os vários comutadores. Cada comutador pode encontrar-se directamente ligado a um nó – sendo as ligações dedicadas e predefinidas que daí resultam características de uma rede directa – ou existirem comutadores interligados, parte de um sistema central de interligação característico de uma rede indirecta. Os protocolos que definem estes tipos de rede afectam directamente a eficiência das comunicações e, conseqüentemente, o desempenho da máquina de computação paralela.

<sup>4</sup>Do inglês: *routing techniques*.

<sup>5</sup>Do inglês: *switching techniques*.

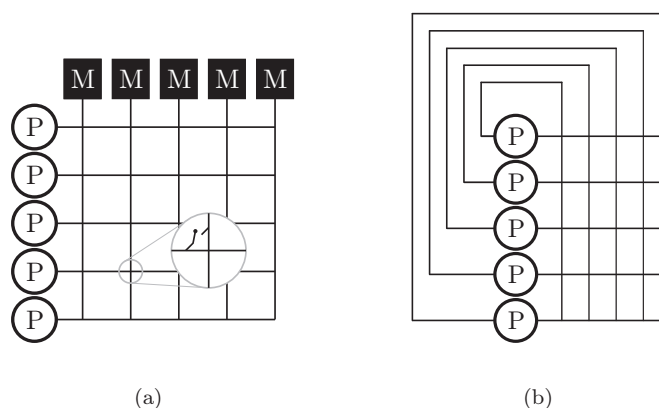


Figura 3.3: Representação esquemática dos *cross switches* (a) unilateral e (b) bilateral.

### 3.2.2 Arquitecturas MIMD

Neste trabalho utilizam-se arquitecturas MIMD. Estas classificam-se quanto ao tipo de organização de memória como multiprocessadores (memória partilhada) ou multicomputadores (memória distribuída).

Os multiprocessadores são constituídos por vários processadores interligados que comunicam através de uma barramento (*bus*) comum com uma memória partilhada. Cada posição de memória só pode ser acedida por um processador de cada vez. Os multiprocessadores são ainda classificados, de acordo com o tipo de acesso à memória, segundo os modelos UMA (*Uniform Memory Access*), NUMA (*Non-Uniform Memory Access*) e COMA (*Cache-Only Memory Architecture*) [Hwang 1993]. Actualmente, este é um tipo de arquitectura presente na maioria dos computadores através do uso de processadores multinúcleo (*multi-core*). Estes processadores constituem sistemas MIMD de memória partilhada com a particularidade de todos os processadores se encontrarem no mesmo *socket*, sendo classificados de CMP (*Chip Multiprocessor*). Todos os núcleos usam o mesmo barramento para aceder à mesma memória principal, partilhando normalmente memória de acesso rápido *cache* (L2). Os diferentes núcleos executam tarefas em paralelo e cada núcleo é capaz de executar diferentes *threads* ( $\sim$  linhas de execução). A evolução dos processadores neste sentido deve-se essencialmente a facto de, com a actual tecnologia e arquitecturas, se estar a atingir o limite de desenvolvimento dos núcleos actuais. Apesar da lei de Moore prever a duplicação do número de transístores por circuito integrado de silício, assim como, consequentemente, da velocidade de processamento destes circuitos, a cada 18 a 24 meses, prevê-se que, por aproximação ao limite atómico dos materiais que os compõem, a evolução da capacidade de processamento de núcleos individuais abrande nos próximos anos [Reed e Tour 2000]. Além disso, há uma crescente necessidade de executar inúmeras tarefas em simultâneo, mesmo em computadores pessoais, migrando-se no sentido de cada vez maior paralelismo.

Os multicomputadores, por sua vez, têm blocos de memória independentes associados a cada computador. Todos os acessos a essa memória são realizados através dos barramentos associados a esse núcleo, segundo instruções desse processador. Esta arquitectura é por isso designada também de NORMA (*NOn-Remote Memory Access*). Neste caso, o processamento paralelo é feito por comunicação entre os vários processadores, cada um com o seu espaço de alocação próprio. Os multicomputadores são constituídos por um conjunto de nós interligados por uma rede de comunicações. Cada nó corresponde a um computador autónomo, constituído por processador, memória primária e os diversos componentes periféricos necessários ao seu funcionamento. A utilização deste tipo de sistema revela-se vantajosa na resolução de problemas em que não é exigida grande

quantidade de comunicações entre processadores, sendo a maior parte do processamento executada localmente, sem conflitos de acesso a memória. Das arquitecturas multicomputador destacam-se os *clusters*, em particular o *cluster* Beowulf abordado em detalhe no Capítulo 8 deste trabalho. Outra arquitectura ainda em utilização em sistemas de grandes dimensões corresponde aos computadores de processamento maciçamente paralelo MPP (*Massive Parallel Processors*) [Marchi e Massaioli 1997, Yagawa *et al.* 1997]. Estes computadores possuem memória distribuída e são geralmente constituídos por várias centenas de processadores. As versões actuais são muitas vezes constituídas por uma estrutura hierárquica com processadores MPPA (*Massively Parallel Processor Array*) em paralelo. Estes processadores são constituídos por um número elevado de núcleos que partilham o mesmo circuito, num número muito superior às arquitecturas multinúcleo. Com custos muito superiores à maioria dos *clusters*, este tipo de sistema é usualmente utilizado para a resolução de problemas de cálculo intensivo que envolvem simulações com grandes quantidades de dados [Pinho-da-Cruz 2007]. Refira-se ainda que a tendência actual é a de conjugação das capacidades dos dois tipos de arquitecturas MIMD referidos, aproveitando as vantagens de ambos. Assim, utilizam-se arquitecturas multicomputadores com máquinas que, por sua vez, têm estruturas multiprocessadores, conjugando características de memória distribuída e memória partilhada.

Na figura 3.4 ilustram-se as configurações multiprocessador do tipo COMA e de multicomputador, onde P representa uma unidade de processamento, M uma unidade de memória e C uma unidade de memória de acesso rápido *cache*.

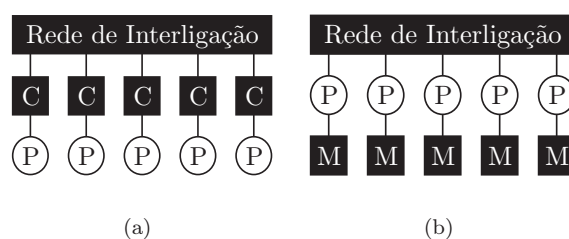


Figura 3.4: Representação esquemática do modelo (a) COMA de um multiprocessador e (b) multicomputador (NORMA).

### 3.2.3 Avaliação de Desempenho

Existem múltiplos aspectos relevantes na avaliação de desempenho de um sistema de computação paralela, como a capacidade de processamento, a largura de banda e latência da rede de comunicações, a capacidade de processamento de cada processador, *etc.* Com a necessidade de uma medição objectiva da influência destes factores, a forma mais frequente de avaliação de desempenho consiste na comparação dos tempos de execução de algoritmos em série e em paralelo. Neste ponto, para além das características intrínsecas de processamento de cada parte do sistema, a comunicação e o seu peso no processo global constitui um dos elementos mais importantes. O custo das comunicações advém, por um lado, da programação do algoritmo e, por outro, das características de *hardware* do sistema. Estas características são habitualmente contabilizadas em termos de largura de banda — quantidade efectiva de informação que pode ser transmitida num dado período de tempo — e latência de comunicação — tempo necessário para o transporte de uma mensagem do processo emissor até ao processo receptor. Estes dois factores determinam a velocidade efectiva de transmissão de uma rede e são ilustrados na figura 3.5. Nesta figura mostram-se também as quatro parcelas principais na latência de comunicação [Hennessy e Patterson 2002]: *overheads* de emissão e de recepção, tempo de transferência e latência de rede. Os *overheads* de emissão e de recepção representam geralmente o factor dominante na latência e comunicação [Hennessy e Patterson 2002]

e correspondem ao tempo que os nós emissor e receptor despendem na interacção com a rede. Este é usualmente o tempo de comunicação entre os dispositivos e a própria rede, na transição entre *buffers* de memória, barramentos internos, dispositivos de rede e protocolos de comunicação. O transporte efectivo da mensagem na rede é representado pelo tempo de transferência e latência de rede. O tempo de transferência traduz a relação entre o comprimento da mensagem e a largura de banda efectiva disponível para cada nó e o tempo de latência da rede depende directamente da tipologia de rede e dos dispositivos de comutação intermédios, que induzem tempos de latência próprios [Pinho-da-Cruz 2007].

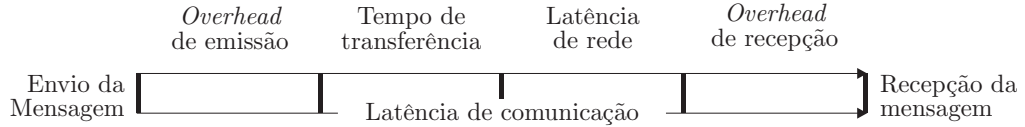


Figura 3.5: Representação esquemática da latência de comunicação de uma mensagem.

Em termos de avaliação de desempenho global de um sistema, os principais parâmetros utilizados são o *speed-up* e a eficiência. O *speed-up*,  $S_p$ , traduz a relação entre o tempo da execução em série e o tempo de execução em paralelo, ou seja, quantas vezes o programa paralelo é mais rápido que a sua versão sequencial. A definição de *speed-up* é

$$S_p = \frac{t_s}{t_p}, \quad (3.1)$$

onde  $t_s$  é o do tempo de execução do algoritmo sequencial e  $t_p$  o tempo de execução do algoritmo paralelo. Note-se que um sistema paralelo ideal, constituído por  $n_p$  processadores idênticos, terá  $S_p = n_p$ . Este sistema terá uma eficiência,  $e_p$ , de 1 (= 100%), definida por

$$e_p = \frac{S_p}{n_p}. \quad (3.2)$$

A eficiência é então um parâmetro que indica o grau de aproveitamento dos recursos de processamento, representando a fracção de tempo despendido pelos processadores exclusivamente na execução do algoritmo paralelo. Na realidade, os processadores não consomem tempo unicamente na execução do algoritmo. Parte é despendida noutras tarefas como, por exemplo, na comunicação entre os processadores ou em componentes do algoritmo executadas em série. Assim, os sistemas reais apresentam tipicamente valores de *speed-up* inferiores a  $n_p$  e eficiências inferiores a 1.

Um dos factores que limita o *speed-up* é a fracção do algoritmo executada de modo sequencial num sistema paralelo. Considere-se um programa constituído por uma parte  $S$  correspondente a uma fracção  $f$  intrinsecamente sequencial, *i.e.* não-paralelizável, e uma parte  $P$  correspondente a uma fracção  $(1 - f)$  susceptível de ser paralelizada. Verifica-se o tempo de execução em paralelo, em  $n_p$  processadores, pode ser calculado como

$$t_p = ft_s + \frac{(1 - f)t_s}{n_p}. \quad (3.3)$$

Assim, se a execução da parte susceptível de ser paralelizada num computador com  $n_p$  processadores decorrer de modo ideal (com  $S_p = n_p$ ), de acordo com a lei de Amdahl [Amdahl 1967], o *speed-up* total será

$$S_p = \frac{1}{f + \frac{1-f}{n_p}}. \quad (3.4)$$



Conclui-se assim que o máximo valor do *speed-up* é  $1/f$ , com  $n_p \rightarrow +\infty$ . A lei de Amdahl (*vd.* Fig. 3.6) permite prever o desempenho da versão paralelizada de um dado algoritmo. Mostra ainda que é necessário reduzir os blocos sequenciais para se melhorar o seu desempenho em paralelo. Note-se ainda que a execução da parte paralelizável de uma aplicação paralela dificilmente ocorre de modo ideal pelo que o valor de *speed-up* obtido será inferior ao previsto na equação 3.4. O aumento do número de processadores na resolução de um determinado problema pode acarretar o aumento dos tempos de comunicação entre processadores e dos conflitos na partilha de recursos. A partir de um dado ponto, este factor origina inevitavelmente a degradação acentuada do *speed-up* observado [Pinho-da-Cruz 2007].

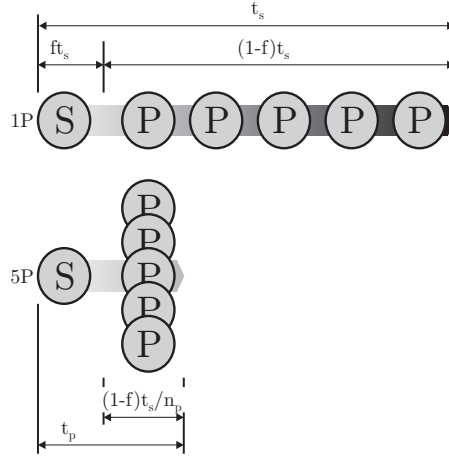


Figura 3.6: Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralelo, para a lei de Amdahl (caso particular de 5 processadores em paralelo).

Note-se que, no entanto, existem situações em que o *speed-up* pode ser superior ao número de processadores  $n_p$  (eficiência superior a 100%). Este *speed-up* é dito sobrelinear e depende normalmente da divisão do domínio do problema global em subdomínios locais. Em algumas situações, as dimensões de um problema podem forçar a utilização de memória virtual por parte dos processadores. A divisão de domínios por um número suficiente de processadores pode reduzir os recursos individuais a níveis em que a utilização de memória primária seja suficiente, aumentando significativamente o desempenho individual e podendo originar desempenhos globais sobrelineares [Barbosa 2000].

É ainda útil considerar os conceitos de granularidade e escalabilidade. A granularidade caracteriza o grau de interacção de um determinado processo. Consiste no número de instruções executadas por cada operação de comunicação [Ibbett e Topham 1989, Stone 1993], considerando-se a execução de um grão de actividade entre cada duas operações de comunicação consecutivas. Assim, um processo que comunica com muita frequência apresenta uma granularidade fina, sendo constituído por grãos de poucas instruções. Processos com granularidade grossa, em contrapartida, comunicam com pouca frequência e têm grãos de actividade com muitas instruções [Martins 1999]. Por sua vez, a escalabilidade traduz a característica de alguns sistemas manterem a sua eficiência aumentando simultaneamente o número de processadores e o grão computacional, *i.e.* a dimensão do problema. Assim, um sistema paralelo escalável permite que se aumente o *speed-up* em proporção directa com o número de processadores. A resolução de problemas de maior dimensão origina um maior grão computacional, diminuindo o peso da latência de comunicação no desempenho. O aumento do tempo de execução de instruções num grão de actividade diminui a fracção de tempo consumido em comunicação, tendendo em diversos sistemas a aumentar a eficiência [Grama *et al.* 1993, Das 1997]. Este fenómeno consiste numa das premissas essenciais



de procedimentos de decomposição de domínio [Smith *et al.* 1996]. A decomposição de domínio consiste num conjunto de estratégias de resolução de equações diferenciais parciais (*e.g.* método de Schwarz [Schwarz 1870]) que visam a obtenção mais rápida de soluções. Estas técnicas recorrem à divisão do problema em partições alocadas a cada um dos processadores para obter a solução global do problema original a partir das soluções de cada um dos subdomínios [Vasconcelos 1998]. Assim, assumindo como exemplo a resolução de um sistema de equações associado a um problema genérico de elementos finitos, tanto a construção do sistema quanto a sua resolução podem ser efectuados de forma dividida pelos diferentes processadores [Kim e Im 2003]. Esta partição não é, para um dado processador, independente da actividade dos processadores vizinhos. Na realidade, é necessária a comunicação de informações relativas às fronteiras dos subdomínios, associada às mútuas influências das diferentes partições sobre o domínio global. Assim, a relação entre os tempos despendidos pelos processadores na execução de instruções num grão de actividade e numa comunicação pode ser vista como uma razão entre um volume e uma área de superfície. No caso do problema de elementos finitos, o volume de cada subdomínio é a porção da malha de elementos finitos associada a um processador e a superfície corresponde aos graus de liberdade partilhados com a malha de outros processadores. A partição de domínios actua directamente sobre estas relações, optimizando a razão entre o volume e a área superficial dos subdomínios no sentido de aumentar a dimensão (volume) do problema local e reduzir a importância relativa da latência de comunicação [Sterling *et al.* 1999]. A eficiência de um algoritmo de partição de domínios influencia directamente a eficiência global da computação paralela, quer pela dimensão quer pela forma e partilha das fronteiras dos subdomínios. Na aplicação do método dos elementos finitos significa que a malha deve ser distribuída de modo a que (i) o número de elementos seja igual nos vários processadores e (ii) o número de elementos adjacentes a fronteiras comuns seja mínimo. Assim, consegue-se uma divisão equitativa da componente de processamento entre os vários processadores e minimizam-se as comunicações associadas às fronteiras. Refira-se ainda que neste trabalho a decomposição de domínios é feita utilizando a biblioteca METIS [Karypis e Kumar 1998].

O facto de a eficiência variar com o grão computacional levou à generalização da lei de Amdahl (*vd.* Eq. 3.4) para problemas de dimensão crescente por parte de Gustafson [Gustafson 1988]. Considerando um computador paralelo associado a um número máximo de processadores  $n_p$ , determinou o tempo de execução de um problema de maior dimensão possível de resolver nessa configuração, ou seja, o maior problema para a memória associada a  $n_p$  processadores. Calculou ainda, por extrapolação do valor obtido anteriormente, o tempo necessário para resolver o mesmo problema numa máquina com um processador apenas, assumindo que tivesse memória suficiente para o seu armazenamento. Através da relação entre os valores obtidos definiu o valor de *speed-up* escalado (*scaled speed-up*) [Gustafson 1988, Davies 1994, Pinho-da-Cruz 2007]. Assim, considerando  $t_p$  como o tempo de execução em  $n_p$  processadores, uma fracção  $f$  de processamento sequencial e uma fracção  $(1 - f)$  de processamento paralelo, o tempo necessário para a execução do mesmo programa numa máquina com um único processador pode ser calculado como

$$t_s = ft_p + n_p(1 - f)t_p. \quad (3.5)$$

Com base na lei de Amdahl (Eq. 3.1) pode calcular-se o *speed-up* escalado como

$$S_e = \frac{ft_p + n_p(1 - f)t_p}{t_p} \quad (3.6)$$

ou, simplificando,

$$S_e = f + (1 - f)n_p. \quad (3.7)$$

Note-se que, ao contrário do *speed-up* traduzido pela lei de Amdahl, o *speed-up* escalado é ilimitado, crescendo proporcionalmente ao número de processadores. Esta consideração é limitada na prática pois as condicionantes e os conflitos da comunicação em rede e a partilha de recursos tendem a reduzir este valor. Note-se que a maior diferença entre as duas definições de *speed-up* apresentadas é uma questão de abordagem. Por um lado, o modelo de Amdahl parte de um problema de dimensão

definida no sentido da minimização do tempo de processamento, *i.e.* maximização de *speed-up* e eficiência. Este modelo toma como referência o tempo de processamento num único processador. Por outro lado, no caso do modelo de Gustafson, a quantidade de memória disponível é considerada como uma restrição inicial e abordam-se problemas com dimensões demasiado elevadas para serem resolvidos em sistemas com menos que um número mínimo de processadores. Neste caso, o grão computacional e os recursos máximos alocados a cada processador são factores preponderantes, tomando como referência o sistema paralelo necessário para resolver o problema. O tempo de execução numa máquina hipotética de um único processador é previsto a partir da referência de execução em paralelo.

### 3.3 Programação em Sistemas de Computação Paralela

A função de um compilador é traduzir a linguagem específica utilizada pelo programador em linguagem de nível mais baixo, num conjunto de instruções adequadas à arquitectura computacional onde serão executadas. É também o compilador que garante que código escrito numa determinada linguagem pode ser adequado a diferentes plataformas, *hardware* e sistemas operativos, *i.e.* portabilidade do código [D'Ambra *et al.* 2002]. No caso específico de arquitecturas de computação paralela, atendendo à variedade de arquitecturas e recursos utilizados, recorre-se a compiladores específicos, desenvolvidos pelos próprios fabricantes de *hardware*, ou a API (*Application Programming Interface*) que garantam a interface entre compiladores comuns, e as especificidades do *software* e *hardware* utilizados. Note-se que o programador deve, de acordo com estes pressupostos, optar por linguagens e paradigmas de programação adequados [Pinho-da-Cruz 2007].

Defina-se em primeiro lugar, na programação de máquinas paralelas, o paralelismo como explícito ou implícito. No paralelismo explícito é o programador que gere os recursos do sistema, não sendo o compilador responsável pelo paralelismo das instruções. O programador faz a gestão dos recursos e controla os fluxos de dados e instruções no sistema. Por um lado, este tipo de paralelismo permite um acentuado controlo sobre todo o funcionamento de um programa, permitindo uma percepção aprofundada do seu funcionamento e a sua optimização. Esta vantagem torna-se também na principal desvantagem, já que a acrescida complexidade do código e maiores requisitos em termos de programação e conhecimentos associados consomem tempo e recursos assinaláveis. A programação é efectuada utilizando um comum compilador do tipo sequencial (*e.g.* Fortran<sup>6</sup> [Campbell *et al.* 1978], C [Kernighan e Ritchie 1978]). Nestes casos, as instruções de paralelismo são controladas usando API ou bibliotecas de funções independentes do compilador, sendo as mais comuns as bibliotecas MPI [MPIF 1994] (*Message-Passing Interface*) e PVM [Sunderam 1990] (*Parallel Virtual Machine*). Por outro lado, no paralelismo implícito é o próprio compilador que verifica os blocos de instruções ou dados que podem beneficiar da execução em paralelo. Neste caso, a programação é feita de forma perfeitamente equivalente à sua versão sequencial. A grande vantagem deste modelo de programação é a grande portabilidade do código, que pode ser utilizado sem alterações em diferentes plataformas e tipos de *hardware*. Em contrapartida, dificilmente se aproveita o verdadeiro potencial de um sistema paralelo e o controlo sobre a paralelização é limitado [Pinho-da-Cruz 2007]. Esta abordagem é ainda pouco abrangente, essencialmente por limitações dos compiladores disponíveis. No entanto, um modelo intermédio é cada vez mais comum. Para além de modelos específicos de separação de *threads* nos sistemas operativos e processadores actuais, são cada vez mais comuns instruções de paralelização automática de ciclos. Estas surgem de modo intrínseco em versões actuais de compiladores de linguagens como Fortran ou C ou recorrendo a API específicas (*e.g.* OpenMP [Graham 1999] (*Open Multi-Processing*)). Na maioria dos casos, basta indicar ao compilador que deve executar um dado ciclo de instruções em paralelo, num modelo de programação semi-implícita. Refira-se ainda que esta é uma abordagem em acentuado crescimento, em grande medida devido às arquitecturas multiprocessador dos actuais

---

<sup>6</sup>Fortran, anteriormente FORTRAN, é um acrónimo derivado da expressão “IBM Mathematical FORMula TRANslating System”.

computadores pessoais. Emergente é ainda o modelo híbrido de paralelismo explícito e implícito, com a utilização simultânea de, por exemplo, MPI e OpenMP.

Em computadores MIMD, os modelos de programação dividem-se normalmente em paralelismo de dados, partilha de memória e passagem de mensagens [Culler *et al.* 1998, Leopold 2001]. O modelo de programação por paralelismo de dados corresponde à execução paralela de uma operação comum sobre diferentes partes de um conjunto de dados. O modelo partilha de memória corresponde à partilha de um espaço de endereçamento comum, leitura e escrita assíncrona de dados. Este modelo é adequado para máquinas de memória partilhada. Para arquitecturas de memória distribuída, o modelo indicado é o modelo de passagem de mensagens. Este é um modelo de programação explícita, correspondente à utilização de API como o MPI, onde se definem as interacções entre os diversos processos do sistema paralelo.

A programação de sistemas de computação MIMD pode classificar-se ainda segundo diferentes paradigmas. Estes paradigmas definem a estrutura dos programas e a abordagem do programador na sua organização. A sua selecção depende essencialmente das características da aplicação, dos recursos computacionais disponíveis e do tipo de paralelismo intrínseco ao problema que se pretende resolver [Pinho-da-Cruz 2007]. Os principais paradigmas usados neste contexto são o paradigma mestre-escravo (*master-slave*) e SPMD (*Single Program-Multiple Data*). O paradigma mestre-escravo assenta na distinção entre um processo mestre e vários processos escravos. O processo mestre coordena a execução das diferentes actividades dos outros processos, sendo responsável pela decomposição do problema e pela distribuição de tarefas pelos escravos. Recolhe ainda os resultados dos diferentes processos depois da sua execução e procede à conclusão da resolução do problema. Neste caso, a comunicação faz-se essencialmente entre mestre e escravos. Refira-se que este paradigma tende a conduzir a um *speed-up* elevado e uma elevada escalabilidade<sup>7</sup>. É possível a ocorrência de problemas de estrangulamento quando o número de processos escravos é muito elevado. Este problema pode ser contornado alterando a estrutura, com o controlo dos processos escravos dividido por diversos processos mestres. Por sua vez, no paradigma SPMD cada processo executa o mesmo programa sobre diferentes blocos de dados. Este tipo de paralelismo é denominado de paralelismo geométrico, de decomposição de domínio ou paralelismo de dados, pelo facto de requerer uma divisão prévia dos dados pelos diversos processadores. Cada processo comunica com os processos vizinhos de modo a manter a integridade do problema total. Assim, o cálculo computacional de cada processador é proporcional à dimensão do subdomínio associado, enquanto que a dimensão das comunicações é proporcional às dimensões das fronteiras entre os subdomínios. Sendo o paradigma mais utilizado em cálculo paralelo, é possível atingir eficiências muito elevadas. Esta eficiência depende logo à partida das metodologias de partição de domínios utilizadas, devendo estas garantir o correcto balanceamento de esforço computacional pelos diversos processadores, assim como uma relação óptima entre a dimensão dos subdomínios e a minimização das suas fronteiras. O maior inconveniente deste paradigma prende-se com a possibilidade de paragem global no caso da falha individual de um processo, por exemplo, em pontos de sincronização. Note-se que a programação é feita muitas vezes segundo ambos os paradigmas, com paralelismo de dados e tarefas [Silva e Buyya 1999, Leopold 2001].

### 3.4 Interface de Passagem de Mensagens (MPI)

Para que aplicações possam utilizar os recursos de rede, precisam de *software* de controlo e referências dos diversos dispositivos e endereços que dela fazem parte. Este *software* surge a diferentes níveis. O nível mais baixo é o dos *drivers* que comunicam directamente com os controladores dos dispositivos de rede. A um nível intermédio surgem os diversos protocolos de comunicação, responsáveis pela forma de transmissão e recepção de informação, verificação, controlo de fluxo e sua formatação. Num nível mais alto aparecem as livrarias de comunicação ou passagem de

---

<sup>7</sup>O paradigma mestre-escravo, no limite, pode ser encarado como computação distribuída, em que a eficiência é sempre próxima dos 100%.

mensagens, como o MPI<sup>8</sup> (*Message Passing Interface*) ou PVM (*Parallel Virtual Machine*). Estas bibliotecas fornecem uma plataforma de comunicação independente, podendo ser usadas por diferentes aplicações ou linguagens de programação. Parte integrante de um modelo de passagem de mensagens, fornecem ao programador funções que permitem definir explicitamente as interações entre os vários processos que decorrem em paralelo em espaços de endereçamento disjuntos.

Neste trabalho, utiliza-se a interface de passagem de mensagens MPI. A biblioteca de funções MPI constitui uma norma amplamente divulgada e utilizada na programação de aplicações em processamento paralelo. Para além do desenvolvimento dos sistemas MIMD de memória distribuída, a grande motivação desta normalização prende-se com a portabilidade das aplicações desenvolvidas. A criação do Fórum MPI em 1992 teve por objectivo a obtenção de uma especificação comum, segundo a qual se obteria compatibilidade entre *hardware* e *software* desenvolvido. O sistema obtido, uma implementação *open-source* do padrão desenvolvido, foi designado de MPICH [Gropp e Smith 1993] (*Message-Passing Interface CHameleon*). Desde a primeira versão do MPI [MPIF 1994], o padrão tem vindo a ser sucessivamente actualizado. Neste trabalho utilizou-se a versão MPI-1.2.7 [Gropp e Lusk 2005], sendo a versão final da especificação MPI-1 correspondente ao MPI-1.3 [MPIF 2008]. As diversas evoluções, para além de melhorias de desempenho e compatibilidade com diferentes sistemas, permitiu uma crescente portabilidade do código-fonte. Refira-se que as versões iniciais permitiam apenas a utilização de sistemas homogéneos. Esta limitação foi corrigida a partir da versão MPI-1.2 [MPIF 1997], assim como na nova especificação MPI-2 [MPIF 1997].

Na especificação MPI-2 existem alguns aspectos adicionais como, por exemplo, gestão dinâmica de processos, acesso remoto a zonas de memória partilhada, paralelismo em operações de entrada/saída e extensões a operações colectivas [Pinho-da-Cruz 2007]. Refira-se que, sendo o padrão MPI-1.2 globalmente adoptado, especialmente em *clusters*, a utilização do MPI-2 tem sido mais limitada. As principais razões são usualmente apontadas à maior complexidade da nova norma. Apesar de uma maior variedade de modos de gestão de processos e comunicações – sendo a possibilidade de I/O paralelo uma das mais valorizadas –, a implementação de *middleware*<sup>9</sup> tem dimensões substancialmente superiores e muitos sistemas não permitem a gestão dinâmica de processos. Existem também muitos programas perfeitamente funcionais e completamente desenvolvidos segundo o padrão MPI-1.2. Nestes casos, a necessidade de adaptar o código e a potencial perda de portabilidade é um forte dissuasor. Adicionalmente, muitas destas aplicações usam apenas uma pequena parte das funções disponíveis no MPI-1.2, contrastando com a elevada quantidade de funções e procedimentos presentes no novo padrão. Note-se, no entanto, que este se vem gradualmente afirmando no mercado. Note-se também que uma das características do MPI-2, o acesso remoto a blocos de memória partilhada, tem vindo a ser conseguido também com implementações mistas de padrões de memória distribuída com memória partilhada. A opção mais comum corresponde à conjugação de uma implementação de MPI com OpenMP, com o primeiro a fazer a gestão de processos remotos e o OpenMP a gestão secundária de processos de memória partilhada em cada nó [Dorta *et al.* 2005].

Nas secções seguintes resumem-se os dois grupos principais de rotinas MPI (padrão MPI-1.2), com os procedimentos de gestão e os procedimentos de comunicação.

### 3.4.1 Procedimentos de Gestão

Os procedimentos de gestão são responsáveis por tarefas globais de definição do programa, como a iniciação, contagem, identificação e finalização de processos paralelos. Mostra-se de seguida um exemplo de programa (Fortran) que ilustra estes procedimentos [Pinho-da-Cruz 2007].

---

<sup>8</sup>O MPI é essencialmente uma API (*Application Programming Interface*) que faz a interface entre uma aplicação e o *software* que controla as comunicações na rede.

<sup>9</sup>O *middleware* ou *software* mediador corresponde à camada de *software* que faz a ligação entre os sistemas operativos e as diversas aplicações que necessitam de ser executadas sobre estes. No caso de sistemas de computação paralela, é responsável pela integração das aplicações, plataformas e protocolos de comunicação, e processamento paralelo nos sistemas nativos.

```
PROGRAM processo
INCLUDE 'mpif.h'
INTEGER ierr, comm, rank, size
CALL MPI_INIT(ierr)
comm = MPI_COMM_WORLD
CALL MPI_COMM_SIZE(comm,size,ierr)
CALL MPI_COMM_RANK(comm,rank,ierr)
WRITE(*,*) 'Processo ',rank,' de ',size,' criados.'
CALL MPI_FINALIZE(ierr)
END
```

A primeira particularidade deste programa é a inclusão do ficheiro `mpif.h`. Neste são definidos os tipos de dados e predefinidas as constantes a serem utilizados pelas funções de MPI. Este ficheiro permite flexibilizar esta definição, de modo a ser facilmente incluído em diferentes programas e garantir a correcta ligação das sub-rotinas MPI ao código Fortran<sup>10</sup>. Este ficheiro pode ainda ser utilizado para fornecer sub-rotinas virtuais, de modo a não serem necessárias alterações de código em implementações em série sem utilização da biblioteca MPI. A iniciação do ambiente MPI é feita com a sub-rotina `MPI_INIT`, que sincroniza todos os processos aquando do início de uma aplicação de MPI. Esta deve ser a sempre primeira sub-rotina de MPI a ser invocada. Por sua vez, a última função MPI deve ser a declaração `MPI_FINALIZE`, responsável pela finalização do ambiente MPI para cada processo onde é invocada. O procedimento `MPI_COMM_SIZE` permite obter o número de processos paralelos activados, *i.e.* número de processadores activos, através da variável `size`. Estes processos são ordenados com o procedimento `MPI_COMM_RANK`, ficando cada dos  $n$  processos (ou processadores) com o seu valor `rank` identificador. A numeração segue a indexação típica da linguagem C, variando entre 0 e  $n - 1$  segundo a ordem dos nós ou processadores definida na configuração de MPICH no sistema em questão. O argumento `comm` define um parâmetro comunicador, um objecto utilizado pelo MPI para determinar que processos estão envolvidos num dado procedimento ou comunicação. Em particular, o comunicador geral `MPI_COMM_WORLD` engloba a totalidade dos processos da aplicação. Assim, no caso apresentado, todos os processos realizam a escrita do seu identificador e do número total de processos.

### 3.4.2 Procedimentos de Comunicação

Os procedimentos de comunicação disponibilizados pelo MPI destinam-se não só à troca de mensagens entre os vários processos mas também a tarefas de sincronismo. Devido à sua variedade e diferentes funções, é conveniente descrever um conjunto de conceitos antes da sua descrição. As funções de comunicação do MPI podem ser classificadas de acordo com o número de processos envolvidos ou com o tipo de transmissão. Quanto ao número de processos em comunicação, as funções podem ser de comunicação ponto-a-ponto ou de comunicação colectiva. Quando dois processos distintos trocam mensagens entre si, em que um processo envia e outro recebe, a comunicação é classificada como ponto-a-ponto. Por sua vez, a comunicação é colectiva quando todos os processos são envolvidos na troca de mensagens e partilham o mesmo comunicador, *i.e.* o comunicador geral `MPI_COMM_WORLD`. O tipo de transmissão pode ainda ser bloqueante ou não-bloqueante, quando classificadas de acordo com o tipo de transmissão. Neste caso, uma comunicação diz-se bloqueante se o processo segue para as instruções seguintes apenas quando é terminada a comunicação em curso. Pelo contrário, uma comunicação não-bloqueante permite a execução de outras tarefas em simultâneo, sem necessidade de comunicação efectiva ou confirmação. No entanto, não garante que a comunicação tenha sido efectivamente concluída. Apesar de poder ser menos fiável, visa a melhoria do desempenho de aplicações paralelas ao não parar a execução de tarefas subsequentes [Pinho-da-Cruz 2007].

---

<sup>10</sup>O MPICH é implementado em C, pelo que necessita de configurações específicas para permitir uma correcta ligação (*linkagem*) com o compilador de Fortran.



As funções de comunicação ponto-a-ponto são essencialmente procedimentos de envio e recepção (*send/receive*) de mensagens entre dois processos distintos, podendo ser bloqueantes ou não bloqueantes de acordo com necessidade de sincronismo ou requisitos de desempenho.

O envio bloqueante no MPI engloba quatro tipos de comunicação. Estes podem ser: síncrono (*synchronous*), em que o processo emissor apenas retoma a sua execução após o processo receptor ter iniciado a recepção da mensagem e se ter concluído a transmissão a partir do *buffer* de emissão; pronto (*ready*), em que a mensagem é enviada pelo emissor assim que receba notificação de espera por parte do receptor, sem a qual ocorre um erro no programa; armazenado (*buffered*), onde a mensagem é copiada do *buffer* do processo emissor para um *buffer* de sistema, previamente definido pelo programador e de onde a comunicação efectiva com o receptor será posteriormente efectuada, e apenas depois procede com a execução; padrão (*standard*), dependente da implementação de MPI considerada [MPIF 1995] e onde os resultados podem variar de acordo com a dimensão da mensagem. Assim, se a mensagem transmitida tiver uma dimensão superior a um valor-limite (*threshold*), o processo ocorre de forma análoga ao envio síncrono. Os procedimentos comunicação ponto-a-ponto de envio bloqueante no MPI são chamados com os comandos `MPI_SSEND` (envio síncrono), `MPI_RSEND` (envio pronto), `MPI_BSEND` (envio armazenado) e `MPI_SEND` (envio padrão). Em termos de recepção, no entanto, no MPI é apenas definido um modo de comunicação ponto-a-ponto bloqueante com `MPI_RECV`. Neste caso, o processo receptor apenas procede com a sua execução ao verificar a recepção integral da mensagem.

Os procedimentos de comunicação ponto-a-ponto não bloqueante permitem que um processo continue a ser executado imediatamente após a sua chamada. Este tipo de sub-rotina é utilizada para melhorar o desempenho das aplicações paralelas. A principal limitação destas funções, pelo facto de não se verificar a correcta realização ou conclusão da comunicação, acaba por ser a falta de garantias de que o *buffer* de envio possa ser manipulado sem corromper os dados a serem transmitidos. Para promover essas garantias, existem funções auxiliares de sincronização para verificar e/ou esperar pela conclusão da transmissão — `MPI_WAIT` e `MPI_TEST`. Refira-se ainda que as funções de comunicação não-bloqueantes, apesar de exigirem alguns cuidados suplementares da parte do programador, ao permitirem a continuação da execução dos processos, eliminam o potencial problema de bloqueio mútuo (*deadlock*). Este fenómeno ocorre quando todos os processos se encontram simultaneamente em espera. Estas funções reduzem ainda o *overhead* de sistema. No MPI, as funções não-bloqueantes correspondem aos mesmos modos de comunicação já referidos para as bloqueantes, *i.e.* `MPI_ISSEND` (envio síncrono), `MPI_IRSEND` (envio pronto), `MPI_IBSEND` (envio armazenado), `MPI_ISEND` (envio padrão) e `MPI_IRECV` (recepção).

As comunicações colectivas, por sua vez, envolvem a comunicação simultânea de todos os processos que partilhem um dado comunicador. O MPI considera por defeito que todos os processos se encontram envolvidos neste tipo de comunicação, apesar do programador poder definir subgrupos de processos para o efeito. Em rigor, as comunicações colectivas consistem na automatização de múltiplas comunicações ponto-a-ponto e são definidas com base nas funções `MPI_Broadcast`, `MPI_Gather`, `MPI_Scatter` e `MPI_Reduce` [Caglar 2004]. Os modos de comunicação podem ser classificados, em termos de processos envolvidos, em três categorias: de um para vários processos, de vários processos para um e de vários processos para vários. Os primeiros dois tipos requerem a actuação de um processo mestre ou raiz (*root*), que comanda o envio ou a recepção. Estas funções podem ser ainda classificadas como funções de sincronização de tarefas, de movimentação de dados e de computação global [Pinho-da-Cruz 2007].

A principal função dedicada exclusivamente a sincronização é a `MPI_BARRIER`. Esta sincroniza todos os processos de um mesmo comunicador, bloqueando-os até que todos a tenham invocado. Na figura 3.7 pode ver-se uma ilustração deste processo, especialmente do facto de todos os processos avançarem de modo sincronizado após o final do bloqueio.

Por sua vez, as principais funções de movimentação de dados são as seguintes (*vd.* Fig. 3.8) [Gropp e Lusk 2005, Caglar 2004]:

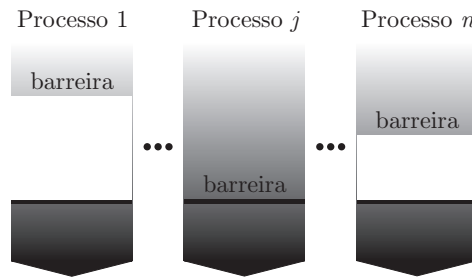


Figura 3.7: Representação esquemática da rotina MPI\_BARRIER.

- **MPI\_BCAST** — difusão dos dados armazenados no *buffer* do processo raiz para todos os processos do mesmo comunicador, incluindo o próprio. A definição da quantidade de dados trocada deve ser exactamente a mesma em todos os processos e no final todos os processos têm a mesma informação;
- **MPI\_GATHER** — recolha dos dados dos *buffers* de emissão de todos os processos com o mesmo comunicador no *buffer* de recepção do processo raiz;
- **MPI\_SCATTER** — dispersão dos dados do *buffer* de emissão do processo raiz pelos *buffers* de recepção dos vários processos com o mesmo comunicador. No final, cada processo tem a sua parte dos dados originais;
- **MPI\_ALLGATHER** — recolha dos dados armazenados nos *buffers* de emissão de todos os processos com o mesmo comunicador em todos os seus *buffers* de recepção;
- **MPI\_ALLTOALL** — dispersão de dados armazenados no *buffer* de emissão de cada processo pelos *buffers* de recepção dos processos com o mesmo comunicador. Cada processo recolhe uma porção de dados de todos os processos do grupo.

As funções **MPI\_GATHERV**, **MPI\_SCATTERV**, **MPI\_ALLGATHERV** e **MPI\_ALLTOALLV**, por sua vez, estendem a aplicabilidade dos procedimentos anteriores ao permitir a comunicação de blocos de dimensão variável ou a localização não-sequencial das mensagens em memória. Note-se o sufixo **V** na definição das funções, relativo ao referido carácter variável das mesmas.

Em termos de computação global, as operações colectivas disponíveis no MPI destinam-se à realização de operações com dados remotos, referidas como operações globais de redução pelo facto de reduzirem informações dispersas a resultados locais. Ao nível elementar, estas operações podem ser do tipo **MPI\_MAX** — valor máximo, **MPI\_MIN** — valor mínimo, **MPI\_SUM** — somatório e **MPI\_PROD** — produtório. A aplicação destes tipos de redução é feita com recurso a diferentes funções de computação global, das quais se destacam (*vd.* Figs. 3.8 e 3.9) [Gropp e Lusk 2005]:

- **MPI\_REDUCE** — operação de redução sobre os dados armazenados nos *buffers* de todos os processos com os mesmos operadores e comunicador, e armazena o resultado no *buffer* de resultados do processo raiz;
- **MPI\_GATHER** — recolha dos dados dos *buffers* de emissão de todos os processos com o mesmo comunicador no *buffer* de recepção do processo raiz;
- **MPI\_ALLREDUCE** — operação de redução sobre os dados armazenados nos *buffers* de cada um dos processos com os mesmos operadores e comunicador, e armazena o resultado nos *buffers* de resultados de todos os processos do grupo;

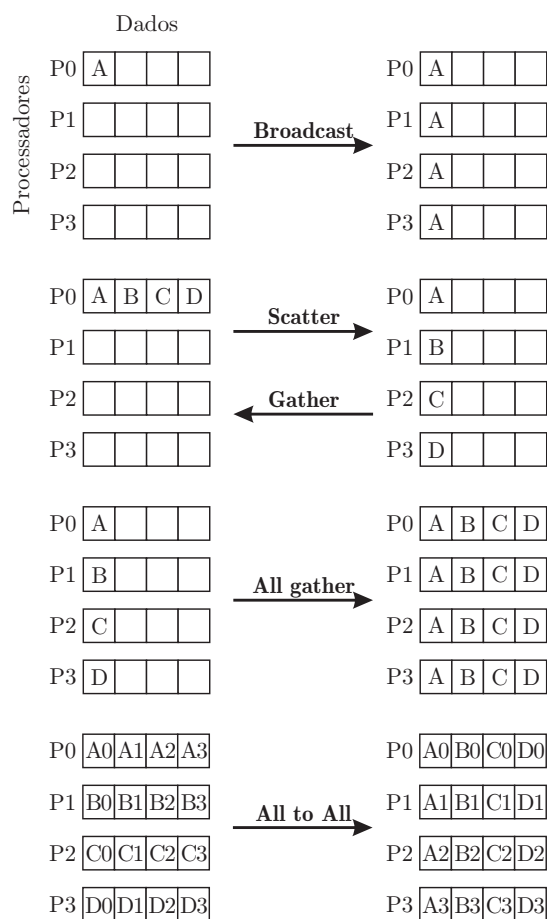


Figura 3.8: Representação esquemática das principais rotinas de movimentação de dados para um grupo de quatro processos.



- **MPI\_SCAN** — operação de redução, com armazenamento de resultado no *buffer* de cada processo (incluindo o próprio), sobre os dados de todos os processos do mesmo operador e comunicador com ordem (*rank*) inferior ou igual à sua.

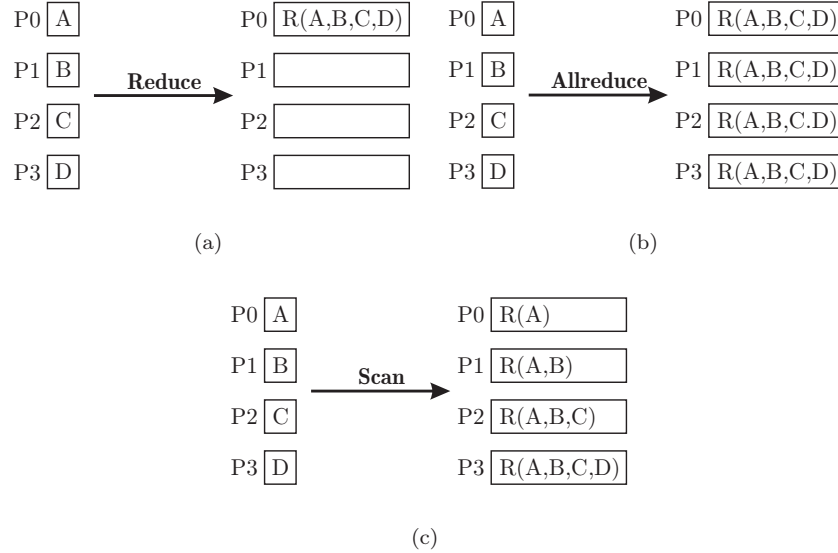


Figura 3.9: Representação esquemática de rotinas de computação global: (a) **MPI\_REDUCE**, (b) **MPI\_ALLREDUCE** e (c) **MPI\_SCAN**.

Refira-se ainda que, à exceção da função **MPI\_BARRIER**, destinada exclusivamente a sincronização, a utilização de funções de comunicação colectiva não garante sincronização. Isto deve-se ao facto destas funções libertarem a execução de cada processo assim que a sua contribuição individual terminar. Note-se ainda que as funções apresentadas constituem apenas uma parte essencial do protocolo padrão de passagem de mensagens MPI. Adicionalmente, o padrão MPI 2 permite muitas tarefas inexistentes ou pouco desenvolvidas no padrão MPI 1, nomeadamente ao nível, por exemplo, da gestão dinâmica de processos ou o acesso remoto a zonas de memória partilhada.

### 3.5 Novas Tendências do Processamento Paralelo e Distribuído

Existem diversas tecnologias emergentes em cálculo paralelo desde novas tecnologias de *hardware* a diferentes paradigmas de computação. Por um lado, surge a crescente utilização de co-processadores<sup>11</sup> especializados, como unidades de processamento gráfico (GPU) ou processadores Cell (*Cell BE – Cell Broadband Engine Architecture*). Com estes conseguem-se excelentes desempenhos em computação paralela, formatando o processamento de modo a resolver rápida e repetidamente um conjunto de instruções sobre dados de grão fino. A gestão de memória global e memória de acesso rápido destes processadores, torna a programação muito exigente [Siirola 2009, Sen *et al.* 2011]. Por outro lado, existem actualmente duas grandes abordagens à computação paralela e especialmente distribuída, na forma de *Grid Computing* e *Cloud Computing* [Buyya *et al.* 2009, Shiers

<sup>11</sup>Um co-processador é um processador utilizado para operar de forma complementar ao processador primário (CPU) e garantir o processamento independente de determinadas funções (*e.g.* processamento gráfico, operações de ponto flutuante, processamento de sinal).

2009, Murphy e Goasguen 2010, Sultan 2010]. Estes paradigmas de computação paralela estão intimamente ligados, podendo dizer-se que partem de conceitos comuns.

Com o surgimento do *Grid Computing*<sup>12</sup> surgiu também o conceito de supercomputador virtual [Cunha *et al.* 2005]. Uma arquitectura distribuída *grid* consiste num sistema de computação que recorre a computadores ligados por uma rede convencional. Esta tipologia, apesar de próxima de algumas arquitecturas MIMD heterogéneas, distingue-se pelo facto de ser viável a utilização de virtualmente qualquer computador através de uma rede como, por exemplo, a internet. Contrasta assim com o supercomputador típico, cujos nós de processamento são ligados por redes dedicadas de elevado desempenho. Este conceito foi popularizado ainda na década de 1990 com o arranque do projecto SETI@home<sup>13</sup>. Neste caso, qualquer utilizador da internet pode fornecer parte dos seus recursos computacionais para resolver parte de um problema comum, com o objectivo de analisar dados na procura de vida extraterrestre. Existem actualmente alguns projectos semelhantes, dos quais se podem destacar aqueles inseridos no projecto *World Community Grid*<sup>14</sup>. Estes usam o programa BOINC<sup>15</sup>, definido como *software open-source* para a computação voluntária e rede de computação. Em qualquer um dos casos, o paradigma de computação paralela passa também pela criação de uma plataforma *middleware* específica. O *middleware* corresponde a um conjunto de API com o objectivo de tornar as aplicações independentes das plataformas onde são executadas, sendo aqui responsáveis pela gestão dos dados que são distribuídos para um determinado computador, a ligação ao sistema operativo para utilizar correctamente os seus recursos, e o envio dos resultados de modo a serem correctamente integrados no sistema de processamento distribuído. Refira-se ainda que uma abordagem comum a este tipo de processamento, numa escala mais pequena, corresponde à ligação remota de vários supercomputadores (*e.g. cluster*), de modo a criar uma plataforma cooperativa de processamento paralelo. Torna-se assim possível que diferentes entidades utilizem recursos computacionais superiores a cada um dos seus sistemas isolados, partilhados numa organização segura e flexível [Murphy e Goasguen 2010].

Pode dizer-se que o *Cloud Computing* (computação em nuvem) é uma extensão do paradigma anterior [Buyya *et al.* 2009], onde utilizadores ou diferentes entidades podem ter acesso a um conjunto de aplicações e serviços fornecidos pelo sistema computacional de qualquer ponto de acesso remoto. Actualmente, a orientação do *Cloud Computing* é a de disponibilizar serviços através da internet. Este serviço torna-se atractivo ao reduzir os custos associados à existência de recursos locais, sendo estes substituídos por simples pontos de acesso e pagamento de serviços. Note-se que estes serviços abrangem actividades tão distantes quanto plataformas de cálculo paralelo, armazenamento de dados, sistemas operativos ou aplicações remotas de trabalho. Salientam-se alguns exemplos de um universo de alternativas em crescimento:

- Amazon Elastic Compute Cloud — plataforma que permite a execução de aplicações de base Linux. O utilizador pode criar a sua própria máquina virtual AMI (*Amazon Machine Image*) ou seleccionar AMI de uma livreria de configurações predefinidas. O serviço é pago em termos de tempo de actividade e trocas de informação.
- Google App Engine — permite ao utilizador executar aplicações desenvolvidas na linguagem Python, para além da execução de todas as API fornecidas pela Google. Note-se que a empresa quer expandir o este conceito com a abordagem adoptada no seu Chrome OS, onde as aplicações utilizadas num computador pessoal se reduzem a um *browser* de internet e as API funcionam remotamente nesta plataforma. Estes serviços são actualmente gratuitos.
- Microsoft Azure — esta plataforma é definida pela empresa como um sistema operativo utilizado como um serviço remoto. Este sistema pretende fornecer uma grande variedade

---

<sup>12</sup>O termo *grid* surgiu na década de 1990, utilizado como uma metáfora com o potencial da computação ser de tão fácil acesso como a electricidade na rede pública (*power grid*) [Foster e Kesselman 1999].

<sup>13</sup>SETI@home (*Search for Extraterrestrial Intelligence*) – <http://setiathome.berkeley.edu/>.

<sup>14</sup>*World Community Grid* – <http://www.worldcommunitygrid.org/>.

<sup>15</sup>BOINC – <http://boinc.berkeley.edu/>.

de serviços aos seus clientes, entre ferramentas de desenvolvimento, bases de dados, serviços associados à internet, API remotas, *etc.*

- Sun network.com (Sun Grid) [SunMS 2009a, SunMS 2009b] — permite que o utilizador execute o sistema operativo Solaris<sup>16</sup> e aplicações Java, C, C++, e Fortran. A Sun fornece plataformas de desenvolvimento local que permitem a compilação e o teste das aplicações segundo os requisitos da plataforma *cloud*. O utilizador pode depois fazer *upload* das aplicações para execução remota e monitorizar o seu funcionamento. Refira-se ainda que a Sun tem ainda o projecto Sun Open Cloud, onde pretende fornecer serviços e API gratuitos e *open-source*. A empresa disponibiliza regularmente relatórios técnicos sobre o tema.

Estas soluções podem representar um importante ponto de viragem na forma como se utilizam ferramentas e recursos computacionais de grande escala, oferecendo elevada flexibilidade, eficiência e escalabilidade maciça. Note-se ainda que muito do potencial de desenvolvimento e flexibilidade destas plataformas é fomentado pelo movimento *open-source* [SunMS 2009b].

Destaca-se ainda, como referência dos sistemas de processamento mais potentes do mundo, a lista<sup>17</sup> TOP500. Todos os anos, em Junho e em Novembro, são publicadas as listas dos sistemas mais rápidos do mundo, assim como diversas estatísticas relevantes. De entre estas, destaca-se a evolução do tipo de arquitectura das máquinas presentes neste *ranking* ao longo do tempo, ilustrada na figura 3.10. Note-se que o número de *clusters* na lista Top500 subiu de apenas 2,2% (11) em Junho de 1999 para 81,4% (407) em Junho de 2012. Mostra-se ainda a evolução do tipo de sistema operativo utilizados, ilustrada na figura 3.11.

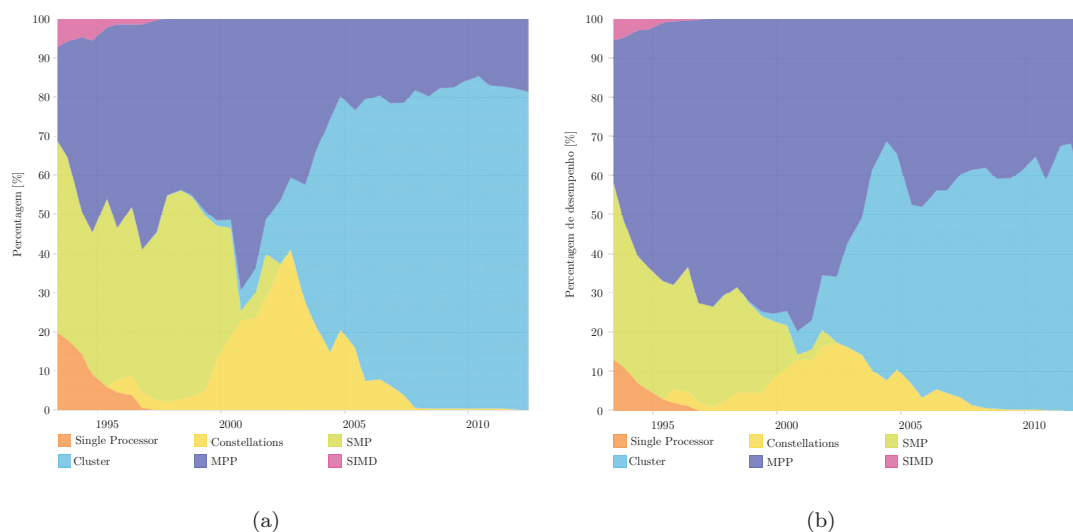


Figura 3.10: Arquitecturas TOP500, lista de Junho de 2012: (a) parcela de sistemas e (b) parcela de desempenho global, de 1993 a 2012 [TOP500 2012].

<sup>16</sup>O Solaris é a distribuição oficial de Linux da Sun Microsystems, actualmente subsidiária da Oracle. Existe também uma versão *open-source*, o OpenSolaris.

<sup>17</sup>TOP500 — <http://www.top500.org/>.

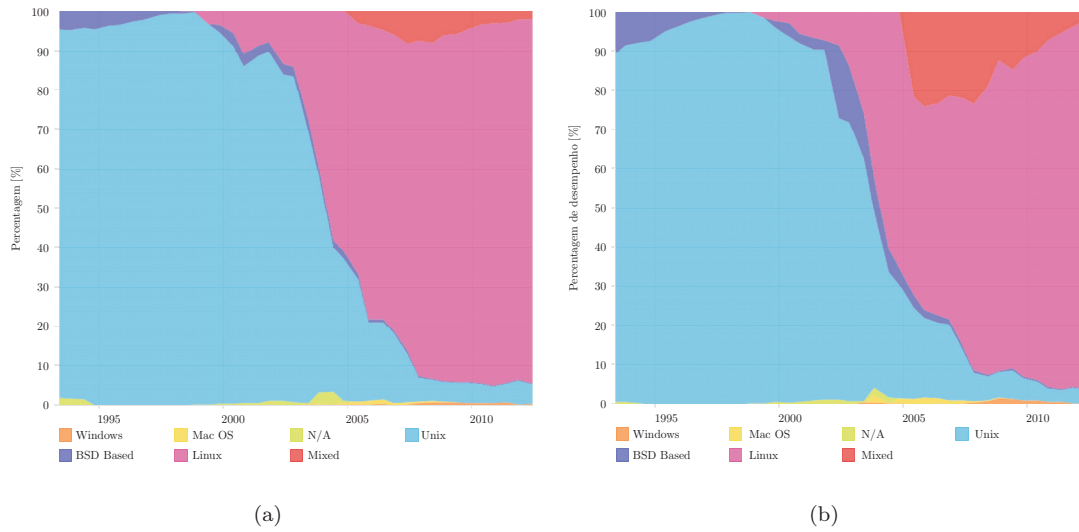


Figura 3.11: Família de sistemas operativos, lista TOP500 de Junho de 2012: (a) parcela de sistemas e (b) parcela de desempenho global, de 1993 a 2012 [TOP500 2012].

## Parte II

# Modelação Matemática e Numérica



## Capítulo 4

# Modelação do Comportamento Termoelástico Linear

*Apresenta-se a formulação geral dos problemas térmico e termomecânico. Procede-se às suas formulações fracas e discretizações espaciais recorrendo ao método dos elementos finitos.*

---

### 4.1 Introdução

O comportamento mecânico de um material, em particular o comportamento linear elástico, é influenciado por variações de temperatura originadas por fenómenos de transferência de calor. Esta dependência corresponde a fenómenos de termoelasticidade e está presente em diversas áreas de aplicação. Consideram-se neste trabalho um conjunto de hipóteses que permitem a sua avaliação segundo pressupostos de linearidade. A termoelasticidade linear combina a elasticidade linear com a condução de calor. A consideração de regime transitório nos fenómenos de transmissão de calor, para além de complexa, está fora do âmbito geral dos problemas de optimização aqui desenvolvidos. Nos problemas abordados, sem erros significativos nas aplicações em estudo, ignoram-se os termos de acoplamento termomecânico nos problemas térmico e mecânico, e o termo de inércia na equação de movimento. Neste caso, define-se o problema como de termoelasticidade quase-estática desacoplada [Fung e Tong 2001]. Este problema divide-se então num problema linear de condução de calor (transiente ou quase-estático) e num problema quase-estático de elasticidade linear, em seguida denominado de termoelástico.

Neste capítulo apresenta-se a formulação do problema térmico, considerado neste trabalho como quase-estático, assim como a formulação geral do problema de termoelasticidade linear. Procede-se ainda à discretização espacial destes problemas por elementos finitos.

## 4.2 Problema Térmico — Condução de Calor em Regime Estacionário

### 4.2.1 Formulação Diferencial

A transmissão de calor em meios sólidos faz-se no seu interior, por condução, ou através da sua fronteira. A equação que descreve a transmissão de calor num meio sólido<sup>1</sup>  $\Omega \in \mathbb{R}^3$  (vd. Fig. 4.1) em regime estacionário corresponde, considerando um referencial cartesiano ortonormado, a

$$\operatorname{div}(\mathbf{q}_k) - Q = 0 \quad \text{em } \Omega. \quad (4.1)$$

$\mathbf{q}_k$  é o vector de fluxos superficiais, por unidade de área, de calor por condução.  $Q$  representa a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume.

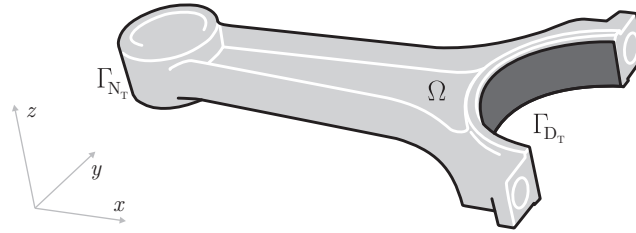


Figura 4.1: Representação esquemática dos domínios associados ao problema térmico num corpo sólido tridimensional.

Segundo uma lei constitutiva geral para problemas de escoamento potencial, correspondente à lei de Fourier em condução de calor [Fourier 1822], tem-se que

$$\mathbf{q}_k = -\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T) \quad \text{em } \Omega, \quad (4.2)$$

onde  $\mathbf{k}$  e  $\operatorname{grad}(T)$  são o tensor de condutividade térmica e o gradiente do campo de temperaturas, respectivamente. Substituindo a equação 4.2 em 4.1, tem-se que

$$-\operatorname{div}[\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] - Q = 0 \quad \text{em } \Omega. \quad (4.3)$$

É necessário impor as condições de fronteira associadas ao problema térmico para resolver a equação 4.3. Podem considerar-se condições de fronteira essenciais ou de Dirichlet, naturais ou de Neumann, e de Robin (uma combinação linear das duas anteriores) [Snyder e Wilkerson 1987]. No presente capítulo não se consideram as condições de fronteira de Robin. As duas primeiras, por sua vez, são definidas nas superfícies  $\Gamma_{D_T}$  e  $\Gamma_{N_T}$ , respectivamente, sendo  $\Gamma_{D_T} \cup \Gamma_{N_T} = \Gamma$  e  $\Gamma_{D_T} \cap \Gamma_{N_T} = \emptyset$ .

As condições de fronteira de Dirichlet correspondem a

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_{D_T}, \quad (4.4)$$

em que  $\bar{T}$  é a temperatura prescrita na superfície  $\Gamma_{D_T}$ . As condições de fronteira de Neumann são definidas por

$$-\bar{q} = [-\mathbf{k} \cdot \operatorname{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} \quad \text{em } \Gamma_{N_T}. \quad (4.5)$$

Estas correspondem à imposição de um fluxo superficial de calor  $\bar{q}$  na superfície  $\Gamma_{N_T}$ .  $\mathbf{n}$  é um versor normal exterior a  $\Gamma$ . O sinal negativo associado à condição de fronteira de fluxo superficial prescrito advém da convenção de que  $\bar{q}$  é positivo quando a transferência de calor se efectua do exterior para o domínio  $\Omega$  considerado, representando assim um aumento de energia do domínio.

<sup>1</sup>O meio sólido ocupa o conjunto aberto  $\Omega \in \mathbb{R}^3$ , delimitado pela fronteira  $\Gamma$ . A resolução do problema térmico em regime estacionário corresponde à determinação de  $T$  em  $\bar{\Omega}$ , sendo  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$  o fecho de  $\Omega$  [Pinho-da-Cruz 2007].



## 4.2.2 Formulação Integral Fraca

A discretização espacial da equação diferencial 4.3 pode fazer-se quer recorrendo a um método variacional quer a um método de resíduos ponderados. Neste trabalho, recorre-se ao método dos resíduos pesados de Galerkin. Para obter a formulação integral fraca do problema utiliza-se o princípio das temperaturas virtuais, análogo ao princípio dos deslocamentos virtuais [Bathe 1996]. A função de ponderação utilizada,  $\delta T$ , define um campo arbitrário de temperaturas virtuais contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $\delta T = 0$  em  $\Gamma_D$ . Multiplicando a equação de equilíbrio 4.3 pelo campo  $\delta T$  e integrando no domínio  $\Omega$ , obtém-se

$$\int_{\Omega} \delta T \{ -\text{div} [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] - Q \} d\Omega = 0. \quad (4.6)$$

Devido à natureza arbitrária do campo de temperaturas virtuais tem-se que a formulação integral forte 4.6 é equivalente à formulação diferencial (forte) 4.3 [Pinho-da-Cruz 2007]. Substituindo a identidade

$$\delta T \text{div} [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] = \text{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] - \text{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \quad (4.7)$$

na equação 4.6 e reorganizando os seus termos, obtém-se

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega = \int_{\Omega} \delta T Q d\Omega + \int_{\Omega} \text{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega. \quad (4.8)$$

A aplicação do teorema da divergência ao segundo termo do segundo membro da equação 4.8 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{div} [\delta T \mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega = \int_{\Gamma} \delta T [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} d\Gamma. \quad (4.9)$$

Sendo  $\Gamma = \Gamma_{D_T} \cup \Gamma_{N_T}$

$$\int_{\Gamma} \delta T [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Gamma_{N_T}} \delta T [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] \cdot \mathbf{n} d\Gamma. \quad (4.10)$$

A substituição das equações 4.5, 4.9 e 4.10 na equação 4.8 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta T) \cdot [\mathbf{k} \cdot \text{grad}(T)] d\Omega = \int_{\Omega} \delta T Q d\Omega + \int_{\Gamma_{N_T}} \delta T \bar{q} d\Gamma. \quad (4.11)$$

Esta equação integral de equilíbrio de fluxos de calor corresponde ao princípio das temperaturas virtuais para o problema térmico associado à equação 4.3 [Zienkiewicz e Taylor 1989]. Segundo este princípio, para que<sup>2</sup>  $T$  seja a solução do problema térmico, a equação 4.11 deverá verificar-se para qualquer campo arbitrário de temperaturas virtuais  $\delta T$  contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $\delta T = 0$  em  $\Gamma_{D_T}$  [Pinho-da-Cruz 2007].

## 4.3 Problema Termoelástico

### 4.3.1 Formulação Diferencial

A equação que descreve o problema termoelástico num meio sólido  $\Omega \in \mathbb{R}^3$  (vd. Fig. 4.2), segundo a teoria das pequenas deformações, corresponde, considerando um referencial cartesiano ortonormado, a

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega. \quad (4.12)$$

---

<sup>2</sup> $T$  é um campo de temperaturas contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $T = \bar{T}$  em  $\Gamma_{D_T}$ .

As relações deformações-deslocamentos linearizadas e as relações constitutivas, segundo a forma geral de Duhamel-Neumann da lei de Hooke, correspondem a

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left\{ \text{grad}(\mathbf{u}) + [\text{grad}(\mathbf{u})]^T \right\} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.13)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta T \boldsymbol{\beta} \quad \text{em } \Omega, \quad (4.14)$$

respectivamente, onde

$$\Delta T = T - T_0 \quad \text{e} \quad (4.15)$$

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\alpha}. \quad (4.16)$$

$\mathbf{D}$ ,  $\boldsymbol{\alpha}$  e  $\mathbf{u}$  são os tensores de elasticidade e de expansibilidade térmica, e o vector de deslocamentos, respectivamente.  $T_0$  é a temperatura de referência.

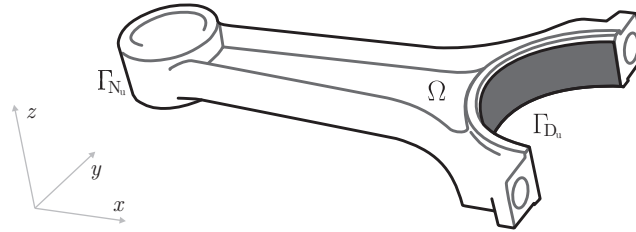


Figura 4.2: Representação esquemática dos domínios associados ao problema termoelástico num corpo sólido tridimensional.

Para a resolução do problema da equação 4.12 consideram-se condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann, definidas nas superfícies  $\Gamma_{D_u}$  e  $\Gamma_{N_u}$ , respectivamente, com  $\Gamma_{D_u} \cup \Gamma_{N_u} = \Gamma$ . Por uma questão de simplificação, consideram-se, para efeitos estritamente de formulação, as fronteiras disjuntas, *i.e.*  $\Gamma_{D_u} \cap \Gamma_{N_u} = \emptyset$ . Tal como no problema térmico, ignoram-se aqui as condições de fronteira de Robin.

As condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann definem-se como

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{em } \Gamma_{D_u} \quad (4.17)$$

e

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{em } \Gamma_{N_u}, \quad (4.18)$$

respectivamente.  $\bar{\mathbf{u}}$  é o deslocamento prescrito na superfície  $\Gamma_{D_u}$  e  $\bar{\mathbf{t}}$  a força superficial na superfície  $\Gamma_{N_u}$ .  $\mathbf{n}$  é um versor normal exterior à superfície  $\Gamma$ .

### 4.3.2 Formulação Integral Fraca

À semelhança do problema térmico, a resolução numérica por elementos finitos do problema termoelástico associado à equação diferencial 4.12 com base no método dos elementos finitos requer a obtenção da sua formulação integral fraca. Recorre-se para o efeito ao princípio dos deslocamentos virtuais. Seja  $\delta \mathbf{u}$  um campo arbitrário de deslocamentos virtuais contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$  em  $\Gamma_{D_u}$ . Partindo da equação 4.12, pode estabelecer-se que

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) d\Omega + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} d\Omega = 0. \quad (4.19)$$

Devido à natureza arbitrária do campo de deslocamentos virtuais tem-se que a formulação integral forte 4.19 é equivalente à formulação diferencial (forte) 4.12 [Pinho-da-Cruz 2007]. Substituindo na equação 4.19 a identidade

$$\delta \mathbf{u} \cdot \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \quad (4.20)$$

obtem-se que

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega. \quad (4.21)$$

A aplicação do teorema da divergência ao segundo termo do segundo membro da equação 4.21 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{div}(\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.22)$$

Esta equação corresponde a

$$\int_{\Gamma} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma = \int_{\Gamma_{N_u}} \delta \mathbf{u} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma. \quad (4.23)$$

considerando  $\Gamma = \Gamma_{D_u} \cup \Gamma_{N_u}$  e  $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$  em  $\Gamma_{D_u}$ . Por sua vez, a substituição das equações 4.18, 4.22 e 4.23 na equação 4.21 resulta em

$$\int_{\Omega} \text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (4.24)$$

Atendendo à simetria de  $\boldsymbol{\sigma}$ , tem-se ainda que

$$\text{grad}(\delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} = \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.25)$$

onde

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left\{ \text{grad}(\delta \mathbf{u}) + [\text{grad}(\delta \mathbf{u})]^T \right\} \quad (4.26)$$

é o campo de deformações virtuais. A substituição das equações 4.14 e 4.25 na expressão 4.24 conduz a

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon} \, d\Omega = \int_{\Omega} \Delta T \, \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\beta} \, d\Omega + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma. \quad (4.27)$$

Esta equação define o princípio dos deslocamentos virtuais para o problema termoeelástico associado à equação 4.12 [Zienkiewicz e Taylor 1989]. Para que  $\mathbf{u}$  seja a solução do problema termoeelástico<sup>3</sup>, a equação 4.27 deverá verificar-se para qualquer campo arbitrário de deslocamentos virtuais  $\delta \mathbf{u}$  contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $\delta \mathbf{u} = 0$  em  $\Gamma_{D_u}$  [Pinho-da-Cruz 2007].

## 4.4 Discretização Espacial pelo Método dos Elementos Finitos

Após se terem obtido as formulações fracas dos problemas térmico e termoeelástico, procede-se às suas discretizações espaciais por elementos finitos.

### 4.4.1 Problema Térmico

De acordo com uma decomposição do domínio  $\Omega$  numa malha de elementos finitos, o campo global de temperaturas pode ser aproximado por

$$T(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \mathbf{T} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.28)$$

$$T(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{N}}_{\Gamma}(\mathbf{x}) \mathbf{T} \quad \text{em } \Gamma, \quad (4.29)$$

onde  $\tilde{\mathbf{N}}$  e  $\tilde{\mathbf{N}}_{\Gamma}$  são as matrizes globais de funções de forma no domínio  $\Omega$  e na superfície  $\Gamma$ , respectivamente.  $\mathbf{T}$  é o vector das temperaturas nodais, com componentes prescritas em nós associados a

<sup>3</sup> $\mathbf{u}$  é um campo de deslocamentos contínuo e suficientemente regular em  $\Omega$ , com  $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$  em  $\Gamma_{D_u}$ .

$\Gamma_{D_T}$ . É possível relacionar o campo de global de temperaturas virtuais com o campo discretizado de temperaturas virtuais  $\delta \mathbf{T}$ , correspondente a quantidades nodais, como

$$\delta T(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{T} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.30)$$

$$\delta T(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{N}}_\Gamma(\mathbf{x}) \delta \mathbf{T} \quad \text{em } \Gamma. \quad (4.31)$$

As suas componentes são nulas em nós de  $\Gamma_{D_T}$ . Substituindo as equações 4.28 a 4.31 na equação 4.11 obtém-se, atendendo à arbitrariedade do campo de temperaturas virtuais e utilizando notação matricial, a equação discretizada

$$\mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{Q} + \mathbf{q}. \quad (4.32)$$

A matriz  $\mathbf{K}$  corresponde à rigidez térmica, neste trabalho constituída exclusivamente pelo termo de condutividade térmica<sup>4</sup>,  $\mathbf{K}_k$ .  $\mathbf{Q}$  é o vector dos termos de geração de calor.  $\mathbf{q}$  é o vector dos fluxos prescritos. Cada uma destas grandezas definem-se como

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_k = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} \tilde{\mathbf{M}} d\Omega, \quad (4.33)$$

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{N}}^T Q d\Omega \quad \text{e} \quad (4.34)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_N + \mathbf{q}_{PN} = \int_{\Gamma_{N_T}} \tilde{\mathbf{N}}_\Gamma^T \bar{q} d\Gamma + \sum_{k=1}^{n_q} (\bar{\mathbf{P}}_N)_k. \quad (4.35)$$

$\tilde{\mathbf{M}}$  é a matriz global das derivadas parciais das funções de forma, *i.e.* de interpolação do campo do gradiente de temperaturas. O vector  $\mathbf{q}_{PN}$  representa o vector de fluxos pontuais (nodais), constituído por  $n_q$  fluxos prescritos  $\bar{\mathbf{P}}_N$ .

#### 4.4.2 Problema Termoelástico

A decomposição do domínio  $\Omega$  numa malha de elementos finitos conduz à aproximação do campo global de deslocamentos por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.36)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_\Gamma(\mathbf{x}) \mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma, \quad (4.37)$$

onde  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{N}_\Gamma$  são as matrizes globais de funções de forma (*i.e.* de interpolação) no domínio  $\Omega$  e na superfície  $\Gamma$ , respectivamente.  $\mathbf{U}$  é o vector dos deslocamentos nodais, com componentes de valor prescrito em nós de  $\Gamma_{D_u}$ . O campo de global de deslocamentos virtuais, por sua vez, é aproximado pelo campo de deslocamentos virtuais discretizado (nodais),  $\delta \mathbf{U}$ , como

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{U} \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (4.38)$$

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_\Gamma(\mathbf{x}) \delta \mathbf{U} \quad \text{em } \Gamma, \quad (4.39)$$

com componentes nulas em nós associados a  $\Gamma_{D_u}$ . Substituindo as equações 4.13, 4.26 e 4.36 a 4.39 na equação 4.27, atendendo à arbitrariedade do campo de deslocamentos virtuais e utilizando notação matricial, obtém-se a equação discretizada de equilíbrio termoelástico,

$$\mathbf{K}_u \mathbf{U} = \mathbf{F}. \quad (4.40)$$

$\mathbf{K}_u$  e  $\mathbf{F}$  são a matriz de rigidez e o vector de forças externas, respectivamente. Estes são definidos como

$$\mathbf{K}_u = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega \quad \text{e} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{F}_T + \mathbf{F}_f + \mathbf{F}_N + \mathbf{R}_N \\ &= \int_{\Omega} \Delta T \mathbf{B}^T \beta d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \mathbf{N}_\Gamma^T \bar{\mathbf{t}} d\Gamma + \sum_{k=1}^{n_r} (\bar{\mathbf{R}}_N)_k. \end{aligned} \quad (4.42)$$

<sup>4</sup>Ignoram-se aqui os termos de convecção e de radiação.

$\mathbf{B}$  é a matriz global das derivadas parciais das funções de forma.  $\mathbf{F}_T$  é o vector de forças de dilatação térmica.  $\mathbf{F}_f$  e  $\mathbf{F}_N$  são os vectores de forças distribuídas no volume  $\Omega$  e na superfície  $\Gamma_{N_u}$ , respectivamente.  $\mathbf{R}_N$  representa o vector de forças pontuais (nodais), constituído por  $n_r$  forças prescritas  $\bar{\mathbf{R}}_N$ .

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Capítulo 5

# Optimização Topológica

*Abordam-se conceitos elementares de optimização topológica em cálculo estrutural. Descrevem-se aspectos de parametrização dos problemas, controlo de estabilidade e métodos de resolução.*

---

### 5.1 Introdução

A designação de optimização topológica é usualmente aplicada a uma área específica da optimização estrutural que lida com a distribuição de material ao longo de um domínio admissível. No entanto, os conceitos da optimização estrutural não são exclusivos da mecânica estrutural, sendo que a natureza variacional do problema em meios contínuos deriva de estudos de problemas de condução (térmica ou eléctrica) [Bendsøe 2001].

A primeira publicação comumente associada à optimização topológica surgiu no início do século XX, onde Michell apresentou critérios de óptimo para a obtenção de estruturas reticuladas de peso mínimo [Michell 1904]. Os seus princípios, com aplicação para fracções volúmicas muito reduzidas [Rozvany 2001], foram mais tarde retomados. A possibilidade de aliar a optimização às ferramentas computacionais então emergentes levou a um crescimento da aplicação computacional da optimização estrutural e a novas aplicações. A utilização de metodologias de programação matemática foi iniciada nos anos 1960, baseada em modelos de estruturas reticuladas e programação linear [Schmit 1960, Dorn *et al.* 1964]. Nas décadas seguintes, Rozvani e outros autores apresentaram vários trabalhos que apresentam desenvolvimentos dos princípios aplicados e generalização para estruturas contínuas [Rozvany 2009]. Um dos primeiros trabalhos com a utilização de meios contínuos discretizados para a resolução de problemas de optimização topológica incidiu sobre a distribuição óptima da espessura em placas elásticas [Cheng e Olhoff 1981]. Este trabalho introduziu também a relevância da microestrutura dos materiais em optimização topológica, temática que levou ao trabalho basilar de Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988]. Neste trabalho, apresentou-se a optimização topológica como ferramenta computacional com aplicação a estruturas contínuas, utilizando variações na microestrutura do material como forma de relaxar o problema discreto de optimização topológica. Este trabalho foi pioneiro na forma como esta temática é abordada, marcando o início de uma fase de grande crescimento. A título de exemplo, refira-se que a abordagem SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalisation*) foi primeiramente introduzida por Bendsøe [Bendsøe 1989] e mais tarde apresentada por Rozvany *et al.* [Rozvany *et al.* 1992],

constituindo uma das metodologias mais utilizadas actualmente na optimização topológica. O crescimento das aplicações de optimização topológica ao cálculo estrutural desde então tem sido acentuado. A influência da forma e da topologia na eficiência de uma estrutura leva a que os procedimentos de optimização constituam ferramentas cada vez mais necessárias no contexto industrial, assim como académico. Os problemas associados têm uma configuração típica em optimização, com variáveis de optimização e variáveis de estado com elas relacionadas. O número destas variáveis é frequentemente elevado, originando alguns compromissos ou simplificações em termos de restrições ou formulação [Bendsøe e Sigmund 2003]. Atente-se ainda na grande variedade de designações atribuídas a metodologias de optimização topológica, dependendo de autores, tipos de abordagem ou métodos associados. Destacam-se as designações GSO (*Generalized Shape Optimisation*) como termo genérico de optimização topológica ou LO (*Layout Optimisation*), usado para estruturas discretas. É comum utilizar neste caso metodologias GSA (*Groung Structure Approach*), de grelha ou malha completamente preenchida com elementos que são seleccionados e configurados de modo a corresponder à melhor resposta possível. Esta abordagem é característica de estruturas discretas, nomeadamente articuladas [Dorn *et al.* 1964], mas tem semelhanças com a malha de elementos finitos utilizada como domínio admissível de um problema geral de optimização topológica em meios contínuos, que alguns autores designam de ISE (*Isotropic Solid or Empty ground structures*). A utilização de métodos evolucionários, por sua vez, enquadra-se normalmente na ESO (*Evolutionary Structural Optimisation*), também designada por SERA (*Sequential Element Rejections and Admissions*) [Rozvany e Querín 2002].

## 5.2 Definição do Problema

A optimização topológica estrutural consiste na procura da distribuição óptima que minimize a flexibilidade, *i.e.* maximize a rigidez. Considere-se um corpo associado a um domínio contínuo  $\Omega$ , através do qual se define a distribuição inicial de material. Considere-se ainda que existem condições de fronteira que garantam o equilíbrio estático deste corpo, na forma de restrições e carregamentos. Numa forma usual, para o problema de elasticidade linear usa-se como medida da flexibilidade da estrutura a função energia de deformação,  $S$ , definida como

$$S = \frac{1}{2} \int_{\Omega} D_{ijkl}(\mathbf{x}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega, \quad (5.1)$$

onde  $\mathbf{u}$  representa o campo de deslocamentos correspondente ao equilíbrio,  $\varepsilon_{ij}$  as componentes do campo de deformações no equilíbrio e  $D_{ijkl}$  as componentes do tensor de elasticidade do material em  $\mathbf{x} \in \Omega$ . Uma forma alternativa corresponde à utilização do trabalho das forças externas (*compliance*), definido como

$$W = \int_{\Omega} b_i u_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i u_i d\Gamma. \quad (5.2)$$

$b_i$  e  $\bar{t}_i$  correspondem às forças externas por unidade de volume e de área, respectivamente. Estas funções podem ser usadas para definir a energia potencial total do sistema como

$$P = S - W = \frac{1}{2} \int_{\Omega} D_{ijkl}(\mathbf{x}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega - \left( \int_{\Omega} b_i u_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i u_i d\Gamma \right). \quad (5.3)$$

De acordo com o princípio da energia potencial total mínima, esta é minimizada pelo campo de deslocamentos  $\mathbf{u}$  que corresponde ao equilíbrio (a variação de  $P$  é nula, *i.e.*  $\delta P = 0$ ).

O problema de optimização topológica pode ser formulado em termos de qualquer uma das grandezas anteriores, recorrendo à formulação mais conveniente para cada aplicação. Uma das formais usuais recorre ao trabalho das forças externas (Eq. 5.2) como medida da flexibilidade da



estrutura, resolvendo o problema de otimização

$$\min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \delta P = 0}} \left( \int_{\Omega} b_i u_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i u_i d\Gamma \right). \quad (5.4)$$

A formulação mais comum deste problema corresponde à sua forma discretizada utilizando o Método dos Elementos Finitos (MEF) e apresentada em notação matricial [Sigmund 2001]. Usa-se, neste caso, uma matriz constitutiva  $\mathbf{D}$  constante em cada elemento finito e o problema escreve-se como

$$\min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f}}} \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \quad (5.5)$$

ou, na sua implementação mais prática,

$$\min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f}}} \int_{\Omega} \mathbf{f}^T \mathbf{u} d\Omega = \min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f}}} \int_{\Omega} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} d\Omega, \quad (5.6)$$

onde a matriz de rigidez  $\mathbf{K}$  é a matriz global que corresponde à assemblagem das matrizes elementares  $\mathbf{k}_e$ , definidas em cada elemento  $e$  como função da matriz constitutiva local  $\mathbf{D}_e$ . Note-se, no entanto, que a utilização do trabalho das forças externas ou da energia de deformação como função-objectivo exige alguns cuidados no caso de problemas com imposição de condições de fronteira essenciais com valores prescritos diferentes de 0. Nestes casos, a estrutura pretendida, de maior rigidez, corresponderá à maximização da energia de deformação (e do trabalho das forças externas) e não à sua minimização [Hassani e Hinton 1998b, Allaire 2002]. Note-se ainda que o mesmo problema se pode formular na sua versão complementar, em função do campo de tensões em vez de deslocamentos. Esta abordagem não é utilizada neste trabalho, mas é usualmente correspondente a uma formulação segundo o princípio de energia complementar mínima e pode ser consultado em diversas referências bibliográficas [Allaire 2002, Bendsøe e Sigmund 2003].

As definições apresentadas podem ser adaptadas, em regime quase-estático, ao problema térmico. Note-se que os problemas térmico estacionário e o problema mecânico são formalmente idênticos. Ambos são definidos como problemas matemáticos (elípticos) típicos de conservação, com relações constitutivas e de compatibilidade específicas, assim como condições de fronteira [Cioranescu e Donato 1999]. Além disso, em ambos os casos os objectivos definem-se em termos da maximização de uma propriedade constitutiva, *i.e.* rigidez e condutividade térmica. Neste sentido, o problema térmico pode ser expresso, usando uma medida da flexibilidade térmica, maximizando a condutividade térmica da estrutura, e ignorando os termos convectivos e radiativos, como

$$\min_{\substack{\mathbf{k}_T \in \mathbf{k}_{T\text{adm}} \\ q_i = -k_{ij} \frac{dT}{dx_j}}} \int_{\Gamma_{N_T}} \bar{q} T d\Gamma. \quad (5.7)$$

Na sua implementação mais prática, recorrendo à usual discretização com o MEF e à notação matricial, o problema pode definir-se como [de Kruijf *et al.* 2007]

$$\min_{\substack{\mathbf{k}_T \in \mathbf{k}_{T\text{adm}} \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T} = \mathbf{q}}} \int_{\Omega} \mathbf{T}^T \mathbf{K}_T \mathbf{T} d\Omega. \quad (5.8)$$

Note-se ainda que este problema pode ser resolvido de modo independente ou como parte de uma abordagem multiobjectivo (*vd.* Sec. 2.4.4). Na abordagem adoptada neste trabalho, os objectivos mecânico e térmico podem simultaneamente ponderados, segundo uma metodologia de soma ponderada, como [de Kruijf *et al.* 2007, Challis *et al.* 2008, Chen *et al.* 2010]

$$\min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \mathbf{k}_T \in \mathbf{k}_{T\text{adm}} \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f} \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T}=\mathbf{q}}} \left( w_t \frac{f_t}{f_t^0} + w_m \frac{f_m}{f_m^0} \right), \quad (5.9)$$

onde  $f_t$  e  $f_m$  correspondem aos objectivos térmico e mecânico, respectivamente. Os valores  $f_t^0$  e  $f_m^0$  correspondem a termos de normalização, ou seja, ao valor de cada um dos objectivos na estimativa inicial, e os valores  $w$  correspondem aos pesos de cada um dos objectivos. A manipulação destes pesos dá origem a análises de Pareto, sendo aqui definidos como  $w_m = 1 - w_t$ , com  $w_t \in [0, 1]$  [Frischknecht *et al.* 2011]. A normalização é essencial neste caso, visto a diferente natureza de cada um dos problemas poder conduzir a diferentes dimensões relativas de cada um dos objectivos. Uma abordagem semelhante é usualmente utilizada na definição de problemas de multicarregamento. Neste caso, a soma ponderada continua a ser aplicada, mas não é essencial a normalização dos objectivos, dependendo acima de tudo da implementação e das necessidades do programador/utilizador. A título de exemplo, a definição do problema 5.4 como sendo de multicarregamento pode escrever-se como

$$\min_{\substack{\mathbf{D} \in \mathbf{D}_{\text{adm}} \\ \delta P = 0}} \sum_{l=1}^L w_l \left( \int_{\Omega} b_i^l u_i^l d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i^l u_i^l d\Gamma \right)_l, \quad (5.10)$$

onde  $L$  designa o número de carregamentos alternativos e  $w_l$  o peso do caso  $l$ .

### 5.3 Parametrização do Problema

Os problemas de optimização topológica são essencialmente problemas de optimização inteira e discreta de larga escala, na sua maioria com formulações onde a previsão da topologia se pode processar com optimização diferenciável. O problema de optimização topológica definido neste trabalho corresponde a obter o subdomínio  $\Omega^*$  de  $\Omega$ , com uma dada fracção volúmica  $f_v$  que optimiza um determinado objectivo. Este objectivo é usualmente uma qualquer medida de rigidez ou flexibilidade que se deseja maximizar ou minimizar, respectivamente. A topologia ideal terá uma forma associada, com elementos estruturais e vazios (ou materiais constituintes distribuídos em diferentes fases). A definição original deste problema corresponde, assim, a um problema de optimização de variáveis discretas. Define-se comumente a variável  $\rho$  como densidade, podendo tomar os valores 1 em  $\Omega^*$  ou 0 em  $\Omega \setminus \Omega^*$ . Este problema genérico pode definir-se como

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \in \{0,1\}, \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \int_{\Omega} \frac{\rho}{V_{\Omega}} dx \leq f_v}} f(\rho), \quad (5.11)$$

onde é implícita a existência de uma função de estado como restrição ou parte integrante da função-objectivo, como, por exemplo, a equação de equilíbrio (*vd.* Sec. 5.2). No entanto, o problema genérico definido na expressão 5.11 não tem solução global. Isto deve-se ao facto da introdução de mais vazios sem se alterar a fracção volúmica geral ir em princípio originar um aumento da eficiência do processo de optimização e melhorar o objectivo [Sigmund e Petersson 1998, Bendsøe e Sigmund 2003, Rozvany *et al.* 2006]. Este fenómeno é normalmente designado como inexistência de soluções. Neste caso, existem duas formas genéricas de obter uma solução de engenharia: (i) modificar o problema de modo a que tenha solução e então proceder à sua discretização ou (ii) discretizar o problema original. Na primeira abordagem existem duas metodologias comuns, nomeadamente baseadas na relaxação ou na restrição do problema. Na segunda abordagem, apesar de se produzirem resultados, diversos autores referem a metodologia como sendo por vezes dúbia, no sentido em que as estruturas produzidas podem não corresponder ao problema contínuo original, sendo este possivelmente indefinido [Haber *et al.* 1996, Sigmund e Petersson 1998, Petersson 1999, Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007]. A discretização destes problemas pode ser feita com recurso ao método dos elementos finitos, dividindo-se o domínio em  $n$  elementos. A variável  $\rho$  é tomada como constante em cada elemento finito, podendo a sua distribuição ser representada com recurso ao vector  $\boldsymbol{\rho}$ , de dimensão  $n$ . A utilização de densidades constantes em cada elemento permite que a integração elementar seja feita da forma habitual, sendo a densidade utilizada

usualmente como operador escalar da rigidez [Sigmund e Petersson 1998]. Assim, o problema discretizado passa a ter a forma

$$\min_{\substack{\rho_i \in \{0,1\}, i=1,\dots,n \\ \sum_{i=1}^n \frac{\rho_i v_i}{V_\Omega} \leq f_v}} f(\boldsymbol{\rho}), \quad (5.12)$$

sendo  $\rho_i$  e  $v_i$  as densidades e os volumes de cada elemento finito, respectivamente. Note-se que no problema 5.12 a inexistência de soluções manifesta-se como uma dependência de malha, onde a solução ideal e a existência de um número crescente de vazios no óptimo dependem directamente do nível de refinamento da malha.

A relaxação de um problema consiste essencialmente em alargar o seu domínio admissível de modo a conduzir à existência de solução. Uma das formas de o conseguir passa pela introdução de detalhe adicional através de processos multiescala, abordados em maior detalhe no capítulo seguinte deste trabalho. Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988] abriram caminho à optimização topológica na sua forma actual, relaxando o problema com a introdução de detalhe ao nível da microescala usando metodologias de homogeneização. Esta abordagem aparece em diversos trabalhos sob diferentes formas, nomeadamente com definição paramétrica de materiais porosos ou recurso a materiais laminados do tipo *Rank-N*, introduzindo assim densidades intermédias devido ao detalhe microestrutural associado a cada valor de  $\rho$  [Thomsen 1992, Jacobsen 1998, Hassani e Hinton 1999, Allaire 2002]. Contudo, a abordagem mais comum para obter um problema bem-condicionado e atingir soluções definidas corresponde a permitir que diferentes tensores constitutivos sejam possíveis para definir as propriedades do material ao longo do domínio admissível. Transforma-se assim o problema original discreto num problema contínuo em que a energia depende linearmente da densidade  $\rho$  [Bendsøe *et al.* 1994, Sigmund e Petersson 1998], passando esta a variar linearmente entre os valores discretos definidos anteriormente, *i.e.* entre 0 e 1. Esta dependência linear resulta numa forma bastante flexível do problema [Sigmund e Petersson 1998], definindo limites de eficiência mecânica das estruturas e permitindo resolver uma maior variedade de problemas (*e.g.* espessura variável de chapa, funcionando  $\rho$  como parâmetro de controlo da espessura local). Por outro lado, pode também restringir-se o problema. Acrescentando constrangimentos adicionais que limitem a variação de densidade ou a sua distribuição, torna-se o domínio admissível mais pequeno que o original, e ao mesmo tempo suficientemente fechado e com solução definida. Algumas formas de o fazer são apresentadas nas secções seguintes, podendo em alguns casos ser também usadas para eliminar problemas de dependência de malha ou melhorar a distribuição final de acordo com o pretendido.

Outra estratégia também utilizada neste contexto, aliada à relaxação do problema discreto com a definição contínua de  $\rho$ , consiste na penalização de densidades intermédias. Esta abordagem é utilizada de modo a permitir a obtenção de soluções discretas [Sigmund e Petersson 1998, Bendsøe e Sigmund 2003], permitindo o pós-processamento de problemas relaxados e evitando a utilização de métodos de optimização discreta, considerados problemas NP-completos quando lidam com variáveis binárias [Klein e Young 2010]. A dificuldade de resolver este problema de optimização na forma original, especialmente aquando de grandes dimensões, leva a que, por razões computacionais, se relaxe o problema. O facto de se permitir uma variação contínua das variáveis acarreta, no entanto, o problema das densidades intermédias. Enquanto que numa abordagem multiescala [Bendsøe 1989, Bendsøe 1995, Hassani e Hinton 1999, Allaire 2002] ou em casos de variação contínua de densidade (*e.g.* problemas de densidade óssea [Andrade-Campos *et al.* 2009, Coelho *et al.* 2009]) as densidades intermédias poderão ter significado físico, na maioria dos problemas estruturais estas são indesejadas. Adicionalmente, estas afastam a solução obtida da solução dos problemas iniciais de variáveis discretas. Assim, recorre-se à utilização de variáveis contínuas com penalização das densidades intermédias de modo a que a solução aproxime a solução discreta, *i.e.* com valores binários. Esta perturbação do problema relaxado tende a aproximar a solução do problema discreto com a intensificação da penalização, especialmente em conjugação com a utilização de filtros ou restrições geométricas [Bendsøe e Sigmund 2003]. Apesar de existirem

diversas estratégias alternativas para a penalização de densidades intermédias [Sigmund e Petersson 1998, Petersson 1999, Allaire 2002, Borrvall 2001, Stolpe e Svanberg 2001a, Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007, Hvejsel e Lund 2011], incluindo as restrições de perímetro, a metodologia mais popular é a chamada SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*)<sup>1</sup>, que designa usualmente a lei de potência [Rozvany *et al.* 1992, Bendsøe e Sigmund 1999]

$$K(\rho) = \rho^p K_0, \quad (5.13)$$

onde  $K_0$  é uma dada propriedade do material de base (correspondente a densidade 1), isotrópico na abordagem geral do método, e  $p$  o factor de penalização que determina a forma como as variáveis são conduzidas aos seus extremos. Como se pode ver na figura 5.1, neste esquema de interpolação não-linear das propriedades, a influência do expoente de penalidade faz com que a densidade efectiva correspondente a valores intermédios da variável  $\rho$  seja inferior, originando uma queda acentuada da propriedade que influencia e tornando os extremos mais favoráveis em termos de solução óptima. Isto deve-se ao facto de, ao longo da variação intermédia de  $\rho$ , o volume se manter proporcional à variável densidade enquanto a propriedade que afecta passa a ser inferior ao valor proporcional. O problema discretizado pode escrever-se como

$$\min_{\substack{0 < \rho_{\min} \leq \rho_i \leq 1, i=1, \dots, n \\ \sum_{i=1}^n \frac{\rho_i u_i}{V_\Omega} \leq f_v \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f}}} f(\rho), \quad f(\rho) = \int_{\Omega} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} \, d\Omega = \sum_{e=1}^n \rho_e^p \mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e, \quad (5.14)$$

onde  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{f}$  e  $\mathbf{K}$  denotam vectores de deslocamento e força, e matriz de rigidez, respectivamente. O índice  $e$  indica quantidades elementares. Note-se que a rigidez do elemento  $e$  é definida como  $\rho_e^p \mathbf{k}_0$ , onde  $\mathbf{k}_0$  corresponde à rigidez elementar de  $e$  quando constituído pelo material de base. Esta definição é equivalente a escrever  $\rho_e^p \mathbf{D}_0$ , onde  $\mathbf{D}_0$  corresponde à matriz constitutiva do material de base.

Existem diversas definições alternativas para este problema, assim como para a própria definição do SIMP. Detacam-se duas alternativas [Bendsøe e Sigmund 1999, Sigmund 2007]. Por um lado, a alteração da lei de potência para

$$K(\rho) = \rho^p K_1 + (1 - \rho^p) K_2 \quad (5.15)$$

permite a interpolação das propriedades de dois materiais (1 e 2), sem vazio e com  $K_1 > K_2$ . Por outro lado, permite também que se defina a propriedade  $K_2$  como o valor mínimo para o correcto condicionamento do sistema de equações de definição do problema inicial, de uma fase de material e domínio complementar vazio. Em qualquer dos casos, esta lei de potência pode ser redefinida como

$$K(\rho) = \rho^p K_0 + (1 - \rho^p) d_m K_0 = [\rho^p + d_m(1 - \rho^p)] K_0, \quad (5.16)$$

em que<sup>2</sup>  $d_m = \frac{K_{\min}}{K_0}$ . Por sua vez, o SIMP modificado,

$$K(\rho) = K_{\min} + \rho^p (K_0 - K_{\min}), \quad (5.17)$$

tem as mesmas implicações práticas.  $K_{\min}$  corresponde ao valor mínimo da propriedade  $K$ , associada ao material de menor  $K$  ou ao mínimo definido para o vazio, sendo diferente de zero para evitar singularidades e problemas de condicionamento. Estas formas alternativas têm algumas vantagens sobre o SIMP original, nomeadamente o facto de o valor mínimo de  $K$  ser independente do factor de penalização. Permite também a consideração de materiais bifásicos e torna-se mais simples de

<sup>1</sup>O acrónimo SIMP é ainda ocasionalmente utilizada para designar *Simple* ou *Simply Isotropic Material with Penalization*, ou ainda *Simple* ou *Simply Isotropic Microstructure with Penalization* [Duysinx 1997, Sigmund e Petersson 1998, Rozvany 2001, Rozvany 2009].

<sup>2</sup> $d_m$  pode assumir diferentes valores para diferentes propriedades.

generalizar para a utilização de uma maior variedade de técnicas de filtragem [Sigmund 2007]. Em qualquer dos casos, sempre que a restrição de volume é activa, o problema tende a convergir para soluções aproximadamente discretas se o factor de penalização  $p$  for suficientemente elevado. Este valor é usualmente tomado como  $p \geq 3$ , apesar de depender do tipo de problema e de propriedades como o coeficiente de Poisson [Bendsøe e Sigmund 1999].

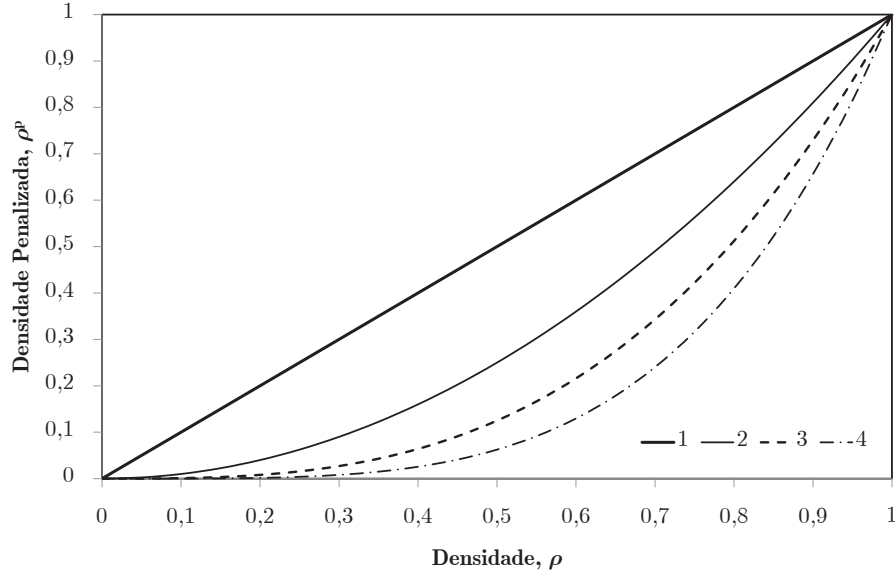


Figura 5.1: Representação da função de penalização SIMP para diferentes penalidades.

Note-se que o conceito de sensibilidade é particularmente relevante na parametrização do problema. A análise de sensibilidade em optimização corresponde ao estudo do gradiente da função-objectivo (ou de restrições) em relação às variações das variáveis do problema. Estes gradientes traduzem a sensibilidade da resposta da função a pequenas alterações destas variáveis. Por um lado, os algoritmos de optimização utilizados neste trabalho são algoritmos que necessitam do cálculo dos gradientes da função-objectivo e das restrições relativamente às variáveis do problema. Por outro lado, a sensibilidade da resposta do problema relativamente à variação de parâmetros de controlo pode ser de enorme relevância para a robustez e a precisão dos métodos utilizados [Amsutz 2010]. No contexto da utilização da estratégia de penalização SIMP, utilizada neste trabalho, a sensibilidade da função-objectivo  $f(\rho)$  relativamente à variável  $\rho$  é determinada pela derivada da componente constitutiva dependente desta variável. Assim, a derivada da propriedade  $K$  definida na expressão 5.13 pode escrever-se como

$$\frac{\partial K(\rho)}{\partial \rho} = p\rho^{p-1}K_0. \quad (5.18)$$

Em particular, no problema de elementos finitos em elasticidade, a sensibilidade de  $f(\rho)$  relativamente a  $\rho$  resulta em

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = -p\rho^{p-1}\mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e, \quad (5.19)$$

para o elemento finito  $e$ . Note-se que o sinal negativo da sensibilidade da função advém da sua definição em termos de trabalho das forças externas. Assim, sendo

$$f(\rho) = \mathbf{F}^T \mathbf{U} = \mathbf{U}^T \mathbf{K} \mathbf{U} \quad (5.20)$$

tem-se que

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = \mathbf{F}^T \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \rho} + \frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \rho} \mathbf{U}. \quad (5.21)$$

Por sua vez, sendo  $\mathbf{KU} = \mathbf{F}$  e atendendo a que  $\mathbf{K}^T = \mathbf{K}$ , resulta que  $\mathbf{U}^T \mathbf{K} = \mathbf{F}^T$ . Assim,

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = \mathbf{U}^T \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \rho} + \frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \rho} \mathbf{U}. \quad (5.22)$$

Por outro lado, tem-se que

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U} + \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \rho} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \rho}, \quad (5.23)$$

pelo que

$$\mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \rho} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \rho} - \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U}. \quad (5.24)$$

Assumindo os carregamentos como condições de fronteira independentes de  $\rho$ , obtém-se

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = \mathbf{U}^T \cancel{\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \rho}}^{\mathbf{0}} - \mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U} + \cancel{\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \rho}}^{\mathbf{0}^T} \mathbf{U} = -\mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U}. \quad (5.25)$$

Note-se ainda que, no caso das penalizações alternativas apresentadas, a sensibilidade da propriedade  $K(\rho)$  (vd. Eq. 5.18) passa a definir-se como

$$\frac{\partial K(\rho)}{\partial \rho} = p\rho^{p-1}(1 - d_m)K_0 \quad (5.26)$$

no caso da interpolação na expressão 5.16 ou

$$\frac{\partial K(\rho)}{\partial \rho} = p\rho^{p-1}(K_0 - K_{\min}) \quad (5.27)$$

para o SIMP modificado definido na expressão 5.17.

## 5.4 Instabilidades Numéricas em Optimização Topológica

Atendendo ao descrito na secção anterior, as instabilidades numéricas e os problemas de convergência para a solução óptima mais comuns em optimização topológica podem dividir-se em três categorias principais [Sigmund e Petersson 1998]: (i) *checkerboards*<sup>3</sup>, (ii) dependência de malha e (iii) mínimos locais. O problema de *checkerboard* (vd. Fig. 5.2(a)) consiste no aparecimento de regiões alternadas de material e vazio, isto é, densidade 0 e densidade 1, na solução do problema de optimização topológica. Esta designação é oriunda da utilização comum de malhas regulares de elementos quadrangulares em problemas bidimensionais, apesar de ser também existente noutros tipos de malha ou elementos finitos, assim como em problemas tridimensionais. Os padrões que caracterizam este fenómeno numérico estão directamente ligados a erros resultantes da modelação numérica da rigidez de elementos distribuídos desta forma. Estes padrões induzem numericamente

<sup>3</sup>O termo inglês *checkerboard* é amplamente utilizado como referência ao padrão de tabuleiro de damas frequentemente desenvolvido durante o processo de optimização topológica. É comum em optimização referir-se este padrão como de tabuleiro de xadrez. Pela falta de uma tradução mais adequada, utiliza-se o termo inglês ao longo deste documento.

uma rigidez demasiado elevada, razão pela qual tendem a aparecer como resultados óptimos de minimização de flexibilidade (maximização de rigidez) [Diaz e Sigmund 1995]. Note-se que este é um problema associado à discretização e não necessariamente ao método de optimização [Rozvany 2009]. Atendendo à origem numérica deste fenómeno, alguns métodos são usualmente utilizados para evitar ou minimizar o seu aparecimento. Destacam-se de seguida os mais comuns. Uma das formas mais simples, desaconselhada por ignorar o fundamento físico do problema, corresponde à utilização de métodos de suavização da solução obtida recorrendo a algoritmos de processamento de imagem. Uma forma mais correcta e eficiente de obter soluções é a utilização de elementos finitos de ordem superior. A utilização de elementos quadráticos permite usualmente a obtenção de melhores soluções. No entanto, o facto de permitirem uma melhor representação dos campos associados ao problema de elementos finitos não é suficiente para garantir a inexistência de problemas de *checkerboard*, dependendo da metodologia utilizada e da correcta escolha de parâmetros de optimização (*e.g.* penalidade) [Diaz e Sigmund 1995]. Adicionalmente, o recurso a elementos de ordem superior acarreta um aumento dos requisitos de processamento e/ou perda de resolução na distribuição óptima. Em alternativa, a família de métodos mais utilizados corresponde à utilização de filtros [Sigmund 1994, Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007]. Estes alteram as sensibilidades ou as próprias variáveis de optimização em cada elemento finito e ao longo do processo iterativo de modo a que dependam dos valores encontrados nos elementos dentro de uma determinada vizinhança. Esta é uma forma eficiente de controlar *checkerboards*, muitas vezes recorrendo a algoritmos e definições adaptadas directamente de técnicas de filtragem usadas em processamento de imagem. Note-se que esta ligação se deve à semelhança formal entre uma malha bidimensional regular de elementos finitos e uma imagem *raster*, *i.e.* mapa de bits, onde a distribuição de resultados do problema de optimização na malha de elementos finitos equivale a uma codificação de cor na representação gráfica. Note-se que estes métodos são normalmente utilizados não só para controlar a formação destes padrões mas também para se obter alguma independência do grau de refinamento da malha. Na verdade, os diversos métodos de controlo de dependência de malha tendem a minimizar os problemas de *checkerboard*. A dependência de malha, ilustrada na figura 5.2(b), resulta directamente do problema de não-existência de solução do problema inicial. Tal como nesse caso, o refinamento da malha tende a permitir o surgimento de detalhe adicional na solução final, sob a forma de um número crescente de vazios e consequente aumento de rigidez, traduzindo soluções qualitativamente diferentes. No entanto o resultado do refinamento de malha deveria idealmente ser uma resolução<sup>4</sup> que permitisse uma melhor modelação da mesma estrutura óptima e uma melhor caracterização das suas fronteiras. O problema de dependência de malha pode dividir-se em duas categorias distintas, associadas (i) ao detalhe adicional que surge do referido problema de não-existência de solução do problema original e (ii) à potencial existência de múltiplas soluções concorrentes. Um exemplo do segundo caso é o problema de tracção uniaxial (*vd.* Fig. 5.2(c)), onde uma solução com uma barra de espessura elevada pode responder ao objectivo exactamente da mesma forma que diversas barras de espessura reduzida. No primeiro caso, a gestão das soluções obtidas pode ser complexa, visto que cada nível de refinamento tenderá a trazer uma melhoria da resposta à função-objectivo. No segundo caso, o refinamento continua a ser possível, mas não necessário. Apesar da potencial existência não-única de soluções ou de subsequentes níveis de refinamento, e consequente melhoria das soluções acarretarem opções que nem sempre são óbvias, é possível impor restrições ao problema que diminuam de forma coerente a dependência do nível de refinamento da malha de elementos finitos [Sigmund e Petersson 1998]. Uma das primeiras alternativas corresponde à já referida relaxação do problema inicial (ou à utilização de parâmetros de penalidade reduzidos no SIMP). Esta solução acarreta a existência de regiões de densidades intermédias, nem sempre desejáveis. As alternativas surgem com a utilização de restrições, locais ou globais, à forma como a variável densidade varia. Os métodos mais utilizados em optimização topológica são: (i) métodos de restrição, como o controlo de perímetro, ou controlo de gradientes locais ou globais [Bendsøe 1995, Haber *et al.* 1996, Duysinx 1997, Petersson 1999], (ii) filtros de

---

<sup>4</sup>É comum, no contexto da optimização topológica, utilizar o conceito de resolução no sentido gráfico, descrevendo o nível de detalhe de uma imagem ou, neste caso, da distribuição de variáveis de optimização numa solução óptima.



independência de malha, actuando sobre sensibilidades ou densidades [Sigmund 1994, Bendsøe e Sigmund 1999, Bourdin 2001, Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007] e (iii) diversos outros métodos alternativos [Kim 2000, Sigmund 2007, Yoon e Kim 2005, Wang *et al.* 2010], dos quais se destacam os *level-set methods* [Challis *et al.* 2008, Boucard *et al.* 2009, Dijk *et al.* 2010, Yamasaki *et al.* 2010]. O problema da convergência para mínimos locais é comum em optimização topológica, especialmente em problemas sem restrições suficientes [Sigmund e Petersson 1998]. As estratégias referidas anteriormente tendem a tornar estes problemas mais convexos, resultando em soluções mais definidas e menos dependentes da resolução. Ainda assim, pequenas variações nos parâmetros utilizados podem conduzir a soluções supostamente óptimas bastante diferentes. A robustez dos algoritmos utilizados pode traduzir-se pela independência destas alterações, garantindo-se o mais possível a convergência para uma única solução, independentemente dos parâmetros utilizados ou da solução inicial. Este tipo de robustez é muitas vezes difícil de obter, em grande medida devido à planeza das funções-objectivo e a características intrínsecas dos próprios métodos de optimização utilizados [van Dijk *et al.* 2010]. Muitas vezes, uma das melhores formas de evitar a convergência para pontos estacionários não-óptimos corresponde à utilização dos chamados métodos de *continuação* numérica<sup>5</sup> [Stolpe e Svanberg 2001b, Groenwold e Etman 2009]. Os problemas com penalização estudados neste trabalho tendem a deixar de ser convexos, podendo originar uma elevada quantidade de mínimos locais. Nestes casos, a abordagem de *continuação* resume-se geralmente a iniciar o processo de optimização sem penalização ( $p = 1$ ), resolver o problema e aumentar gradualmente o parâmetro de penalidade durante o processo iterativo. Este processo vai sendo repetido até que o factor de penalidade seja suficientemente elevado. Deste modo, vai-se gradual e artificialmente convertendo por etapas um problema convexo num problema penalizado não-convexo, evitando a convergência prematura para mínimos locais. Note-se ainda que esta estratégia é frequentemente utilizada com diversos outros parâmetros (*e.g.* penalidade em alguns métodos duais e métodos de penalidade, dimensão de raios de filtragem, *etc.*).

Nas secções seguintes focam-se em maior detalhe algumas das metodologias utilizadas ao longo deste trabalho para abordar alguns destes problemas numéricos.

### 5.4.1 Filtros de Sensibilidade e Densidade

Diversos métodos de restrição para optimização topológica com variável de densidade têm como objectivos principais, por um lado, reduzir a dependência de malha e os fenómenos *checkerboard*, e, por outro, permitir um melhor pós-processamento das geometrias obtidas. Este último é particularmente relevante se se atender à integração da optimização topológica em metodologias conjuntas de optimização estrutural (*vd.* Sec. 2.5.1) e ao objectivo final de otimizar a transição destas soluções para a produção de estruturas reais. De entre destes métodos destacam-se as técnicas de filtragem, de densidades ou de sensibilidades. Estes métodos tendem a gerar distribuições definidas de material, muitas vezes com zonas de transição demarcadas, com espessura dependente da dimensão do filtro. Esta transição é muitas vezes conveniente, nomeadamente para a utilização de isovalores de transição para aproximação geométrica. Contudo, em muitos casos, resultados claramente preto e branco (0/1) permitem uma aproximação mais correcta ao problema discreto original e geometrias de melhor interpretação, com elementos discretos aproximados de dimensão mínima controlada pela dimensão dos filtros. De um modo geral, o filtro ideal deveria corresponder aos seguintes requisitos [Sigmund 2007]: obter soluções independentes de malha e sem problemas de *checkerboard*; obter soluções discretas (0/1); controlar a exequibilidade da solução (raios mínimos de ferramentas, dimensões mínimas de vazios, limitações geométricas, *etc.*); não necessitar de restrições adicionais ao problema de optimização; depender de poucos parâmetros e ser robusto; originar uma convergência rápida e estável; ter aplicabilidade geral; ser de implementação simples; ter um baixo custo computacional.

A regularização da optimização topológica através da utilização de técnicas de filtragem pode ser dividida entre aquela em que os filtros actuam directamente sobre as variáveis do problema

---

<sup>5</sup>Designação adaptada do inglês *continuation methods* ou *numerical continuation*.



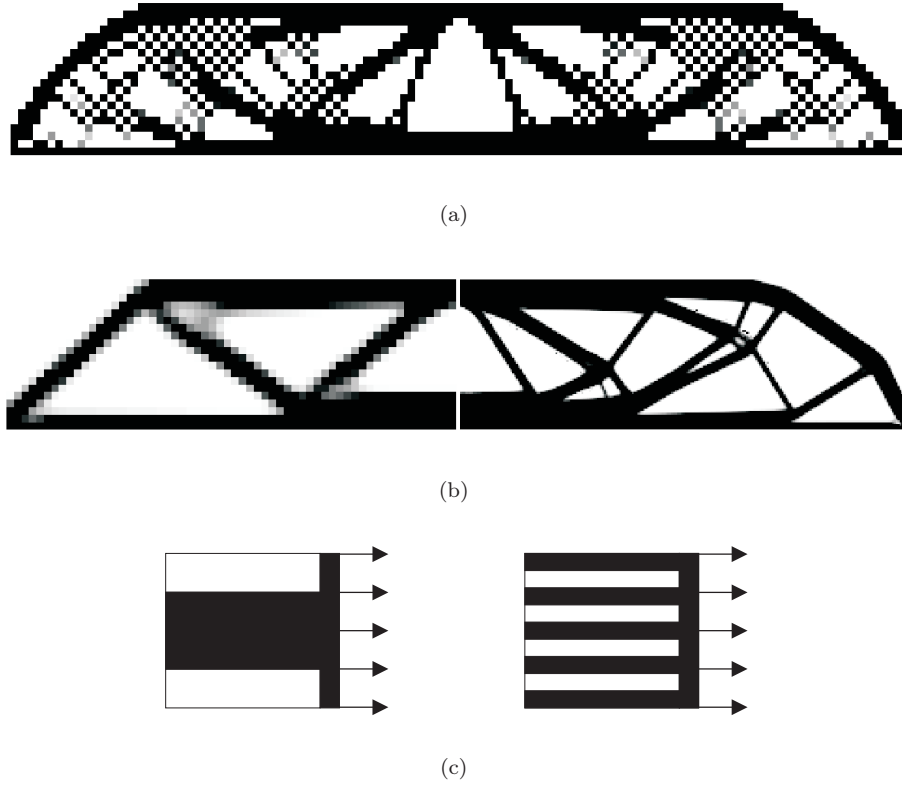


Figura 5.2: Problemas típicos de instabilidade numérica em optimização topológica: (a) *checkerboards*, (b) dependência de malha e (c) soluções não-únicas [Sigmund e Petersson 1998].

e aquela em que os filtros actuam sobre os gradientes ou sensibilidade da função-objectivo às variáveis. No primeiro caso, as densidades são ponderadas com a vizinhança e alteradas antes de se voltar a calcular a função-objectivo. As suas sensibilidades são depois calculadas tendo em conta esta alteração e então utilizadas na actualização das densidades. No segundo caso, estas são calculadas e depois ponderadas com a vizinhança, usualmente com base em métodos puramente heurísticos [Sigmund 1997, Sigmund 2001, Bendsøe e Sigmund 2003]. A vizinhança de um elemento  $e$  define-se aqui pelo conjunto de elementos cujos centros estão a menos de uma dada distância do centro de  $e$ , delimitada pelo raio do filtro  $R_f$ , correspondente a

$$N_e = \left\{ i : \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_e\| \leq R_f \right\}, \quad (5.28)$$

onde  $\mathbf{x}_i$  define a localização do centro do elemento  $i$ . Associado a esta vizinhança surge o peso de ponderação, também designado por operador de convolução<sup>6</sup> [Sigmund 1997, Sigmund 2001, Bendsøe e Sigmund 2003]

$$w_i = \hat{H}_i = R_f - \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_e\|, \quad (5.29)$$

para cada elemento  $i$  na vizinhança  $N_e$ . Note-se que filtros exclusivamente dependentes de distâncias podem acarretar problemas com regiões que se encontrem dentro da distância definida,

<sup>6</sup>O termo convolução, traduzido do termo inglês *convolution*, é usado neste âmbito não apenas no sentido da definição matemática de operador de convolução. É habitual o recurso ao termo, a partir da origem latina *convolutus*, para traduzir um grau qualitativo da complexidade ou sinuosidade das geometrias obtidas.

mas não tenham ligação física ao elemento em análise, podendo originar a degenerescência das soluções obtidas. Assim, ao longo da maior parte deste trabalho, as vizinhanças são definidas com base em conectividades entre os elementos e as distâncias são contabilizadas apenas para ponderação. Na definição das vizinhanças surgem outras complexidades, nomeadamente a gestão das fronteiras da malha de elementos finitos. Idealmente, os filtros deveriam ser expandidos e considerar elementos para além dos limites da malha como elementos vazios. Da mesma forma, fronteiras com condições de simetria deviam contemplar elementos correspondentes a essa simetria, da mesma forma que condições de periodicidade conduziriam à inclusão de elementos cujos graus de liberdade estivessem associados ao elementos em análise. Esta prática é, no entanto, usualmente ignorada [Sigmund 2007].

A filtragem de sensibilidades é largamente utilizada em códigos académicos e comerciais. Estes filtros actuam sobre as sensibilidades, sendo a actualização das variáveis de optimização feita com base nas sensibilidades filtradas. Apesar da sua comprovada robustez para inúmeras aplicações, esta metodologia envolve alguns riscos também. Na realidade, as sensibilidades filtradas podem deixar de representar correctamente os gradientes das variáveis, e criar problemas de convergência ou mesmo paragem prematura dos algoritmos. A versão original do filtro de sensibilidades [Sigmund 1997], para independência de malha, tem origem heurística e pode definir-se como

$$\frac{\partial f}{\partial \rho_e} = \frac{1}{\rho_e \sum_{i \in N_e} \hat{H}_i} \sum_{i \in N_e} \hat{H}_i \rho_i \frac{\partial f}{\partial \rho_i}. \quad (5.30)$$

Em casos onde se permita que o limite inferior da densidade seja igual a zero, nomeadamente nas definições do SIMP descritas nas expressões 5.15 a 5.17, o valor de  $\rho_e$  em denominador deverá ser substituído por  $\max(\rho_e, \varsigma)$ .  $\varsigma$  é um valor positivo reduzido, para evitar a divisão por zero [Andreassen *et al.* 2010]. Para malhas não-regulares, deve ainda proceder-se à seguinte alteração,

$$\frac{\partial f}{\partial \rho_e} = \frac{1}{\frac{\rho_e}{v_e} \sum_{i \in N_e} \hat{H}_i} \sum_{i \in N_e} \hat{H}_i \frac{\rho_i}{v_i} \frac{\partial f}{\partial \rho_i}, \quad (5.31)$$

contemplando assim os diferentes volumes (ou áreas) dos elementos  $i$  na vizinhança  $N_e$  de  $e$ . Note-se que, com esta modificação heurística das sensibilidades, deixa-se de minimizar o problema original, mas sim uma versão suavizada do objectivo inicial [Bendsøe e Sigmund 2003].

Os filtros de densidades actuam directamente sobre as variáveis do problema e, consequentemente, sobre a rigidez. Uma das mais importantes características de um bom filtro em optimização estrutural topológica é a preservação de volume. Este é um problema para muitos filtros, já que existem em alguns casos claras alterações a este constrangimento. Ainda assim, mesmo os filtros com melhor comportamento tendem a induzir pequenas alterações, especialmente se forcingem distribuições puramente discretas. O controlo deste problema deve ser feito associando o constrangimento de volume à variável modificada,  $\hat{\rho}$ , e não à original,  $\rho$ . Na realidade, a relação entre estas duas densidades é um ponto importante na utilização de filtros de densidade. As densidades originais deixam de ter significado físico, tornando-se apenas variáveis intermédias. As variáveis utilizadas para o cálculo da função-objectivo passam a ser as modificadas, pelo que também o pós-processamento e a análise de resultados devem ser efectuados com a versão filtrada das densidades [Kawamoto *et al.* 2011]. Note-se ainda que, apesar de não ser prática comum, a verdadeira representação de densidade e, consequentemente, de fracção de rigidez, deveria ser  $\rho^p$  [Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007]. Curiosamente, a filtragem de densidades foi introduzida depois da filtragem de sensibilidades [Sigmund 1997, Bruns e Tortorelli 2001] e pode ser apresentada de diversas formas. A forma mais comum usa o operador de convolução definido em 5.29 como peso de ponderação de decaimento linear. A densidade filtrada pode definir-se como

$$\hat{\rho}_e = \frac{\sum_{i \in N_e} \hat{H}_i v_i \rho_i}{\sum_{i \in N_e} \hat{H}_i v_i}, \quad (5.32)$$

com  $v$  a designar uma medida de volume do elemento. Note-se que num problema bidimensional esta medida corresponde à área do elemento. O operador de convolução definido na expressão 5.29 corresponde a uma superfície cónica de ponderação em torno do elemento  $e$  [Sigmund 2007]. Alternativamente, uma função mais suave pode ser obtida utilizando uma função de distribuição gaussiana, tornando-se esta a geratriz da superfície de ponderação. Neste caso, o operador de convolução deve ser substituído por

$$w_i = e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_e\|}{\sigma_d} \right)^2}, \quad (5.33)$$

onde  $\sigma_d$  traduz a variância da curva de dispersão. Este parâmetro é originalmente designado, na sua aplicação em técnicas de processamento de imagem, por dispersão fotométrica [Tomasi e Manduchi 1998, Elad 2002].  $\sigma_d$  é função do raio do filtro  $R_f$  utilizado e acarreta a truncagem de parte da superfície obtida [Wang *et al.* 2003, Sigmund 2007]. Pode ainda usar-se um peso de ponderação constante  $w_i = 1$ . O efeito da ponderação de densidades será mais evidente para o peso constante, menor para o caso linear e menor ainda para a versão gaussiana [Sigmund 2007]. Verifica-se também que, a partir do momento em que se filtram as densidades, também as sensibilidades associadas deverão ser actualizadas. Assim, pela regra da derivação em cadeia, passa a ter-se

$$\frac{\partial f}{\partial \rho_e} = \sum_{i \in N_e} \frac{\partial f}{\partial \hat{\rho}_i} \frac{\partial \hat{\rho}_i}{\partial \rho_e}, \quad (5.34)$$

onde a sensibilidade da variável filtrada relativamente a variações na variável original é dada por [Sigmund 2007, Andreassen *et al.* 2010]

$$\frac{\partial \hat{\rho}_i}{\partial \rho_e} = \frac{w_e v_e}{\sum_{j \in N_i} w_j v_j}. \quad (5.35)$$

Existem diversos outros tipos de filtros de densidades. Destacam-se os filtros inspirados em operadores morfológicos de tratamento de imagem, utilizados para eliminar as zonas cinzentas de transição entre densidades e obter soluções discretas. A sua análise e comparação, assim como de alguns outros, pode ser consultada nos trabalhos de Ole Sigmund [Sigmund 2007, Sigmund 2009]. Apesar de implementados, os filtros de densidade não são usados na parte microestrutural deste trabalho por tenderem a deteriorar a periodicidade das distribuições obtidas.

### 5.4.2 Controlo de Perímetro

A obtenção de soluções tendencialmente discretas requer normalmente que sejam feitas alterações ao problema relaxado de optimização topológica. Para além de filtros e outros métodos referidos na secção anterior, destaca-se o controlo de perímetro como uma forma de controlar não só a variação de densidade na solução mas também, em certa medida, influenciar a sua natureza morfológica [Haber *et al.* 1996, Duysinx 1997, Sigmund e Petersson 1998, Petersson 1999]. O perímetro do domínio é essencialmente a soma dos perímetros dos vários limites e vazios da solução obtida. A metodologia usual pressupõe a imposição de um limite superior  $P^*$  para o perímetro  $P$  da solução, resultando numa condição  $P - P^* \leq 0$ . Para uma variação contínua de  $\rho$  o perímetro corresponde a [Haber *et al.* 1996, Sigmund e Petersson 1998]

$$P(\rho) = \int_{\Omega} |\nabla \rho| \, dx. \quad (5.36)$$

Para uma geometria discretizada, considerando uma função contínua por troços, este valor pode calcular-se como [Fernandes *et al.* 1999]

$$P(\rho) = \int_{\Omega} |\nabla \rho| \, d\Omega + \int_{\Gamma_e} |\langle \rho \rangle| \, d\Gamma, \quad (5.37)$$

onde  $\langle \rho \rangle$  traduz a variação da densidade na transição entre elementos que partilham a fronteira de descontinuidade  $\Gamma_e$ . A partir daqui, é possível obter a seguinte medida do perímetro

$$P(\rho) = \int_{\Omega} \left[ \left\{ (\nabla \rho)^T \nabla \rho + \left( \frac{\varsigma}{h} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} - \frac{\varsigma}{h} \right] d\Omega + \int_{\Gamma_e} \left( \sqrt{\langle \rho \rangle^2 + \varsigma^2} - \varsigma \right) d\Gamma. \quad (5.38)$$

$\varsigma$  e  $h$  correspondem a um escalar positivo de valor reduzido, utilizado para garantir a diferenciabilidade do perímetro, e a uma dimensão característica da malha de elementos finitos, respectivamente. Note-se ainda que, ao considerar a densidade constante em cada elemento,  $\nabla \rho = 0$ . Assim, a expressão 5.38 pode resultar em

$$P(\rho) = \int_{\Gamma_e} \left( \sqrt{\langle \rho \rangle^2 + \varsigma^2} - \varsigma \right) d\Gamma. \quad (5.39)$$

Esta definição traduz uma medida da variação de  $\rho$  na estrutura obtida que apenas corresponde efectivamente ao perímetro no caso de não existirem densidades intermédias. Adicionalmente, esta medida de perímetro reveste-se de alguma anisotropia, privilegiando limites paralelos às fronteiras dos elementos finitos. Esta limitação pode analisar-se considerando o exemplo de uma aresta 2-D com uma inclinação de  $45^\circ$ . Neste caso, a medida do perímetro da solução discretizada resulta  $\sqrt{2}$  vezes superior ao valor real [Sigmund e Petersson 1998, Petersson 1999].

A sensibilidade de  $P(\rho)$  relativamente a  $\rho$  corresponde a

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} = \int_{\Gamma_e} \frac{\langle \rho \rangle}{\sqrt{\langle \rho \rangle^2 + \varsigma^2}} d\Gamma. \quad (5.40)$$

Neste trabalho, o constrangimento de perímetro é apresentado como uma restrição adicional ao problema de optimização [Duysinx 1997, Fernandes *et al.* 1999, Petersson 1999, Coelho *et al.* 2008a]. Por outro lado, na primeira implementação do constrangimento de perímetro, Haber *et al.* mostram a sua aplicação como um método de penalidade [Haber *et al.* 1996]. Aqui, o perímetro integra uma função de penalidade interior, tornando assim a minimização da função-objectivo dependente da minimização do perímetro. Note-se que alguns autores utilizam metodologias semelhantes para a penalização de densidades intermédias, como, por exemplo, usando funções de penalização como  $q \int_{\Omega} \rho(1 - \rho) d\Omega$ ,  $q \int_{\Omega} (1/2 - \rho)^2 d\Omega$  ou  $q \int_{\Omega} (\rho_{\max} - \rho)(\rho - \rho_{\min}) d\Omega$  [Haber *et al.* 1996, Fernandes *et al.* 1999, Petersson 1999], onde  $q$  é um escalar positivo. Em qualquer uma das metodologias, a restrição de perímetro necessita de algum esforço de afinação para se obter alguma robustez, apesar de se poder melhorar combinando a sua utilização com técnicas de filtragem [Sigmund e Petersson 1998]. Adicionalmente, a utilização da restrição de perímetro  $P \leq P^*$  pode necessitar de ser testada previamente para se ter noção do perímetro associado à solução não-restringida e se garantir que a restrição não leva à inexistência de solução.

## 5.5 Solicitações Dependentes de Variáveis de Projecto

Apesar da grande variedade de trabalhos publicados acerca das aplicações estruturais da optimização topológica desde o trabalho pioneiro de Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988], apenas uma pequena parte tem sido apresentada acerca da utilização de carregamentos e solicitações dependentes da densidade, como pesos próprios, forças centrífugas ou solicitações termomecânicas. Para além da especificidade acrescida destes problemas, este facto prende-se ainda com algumas dificuldades que este tipo de solicitação traz às metodologias habituais [Bruyneel e Duysinx 2004, Gao e Zhang 2010]. Por um lado, a função-objectivo pode exibir um carácter não-monótono relativamente às variáveis de optimização, com a sensibilidade a alternar de sinal durante o processo iterativo. Neste caso, procedimentos como os de critério de óptimo ou métodos como MMA (*Method of Moving Asymptotes*) ou CONLIN (*CONvex LINearization*) tornam-se desadequados

e a convergência ou não é atingida ou é muito lenta. Por outro lado, o SIMP tem tendência a originar alguns efeitos parasitas de distribuição de densidade para zonas de densidade baixa [Gao e Zhang 2010]. Este efeito é também visível em alguns resultados locais de optimização hierárquica estudados neste trabalho e deve-se ao facto de a função de penalização SIMP ter derivada que tende para zero com a redução da densidade (*vd.* Fig. 5.3). Este facto acentua-se com o aumento da penalidade [Stolpe e Svanberg 2001a].

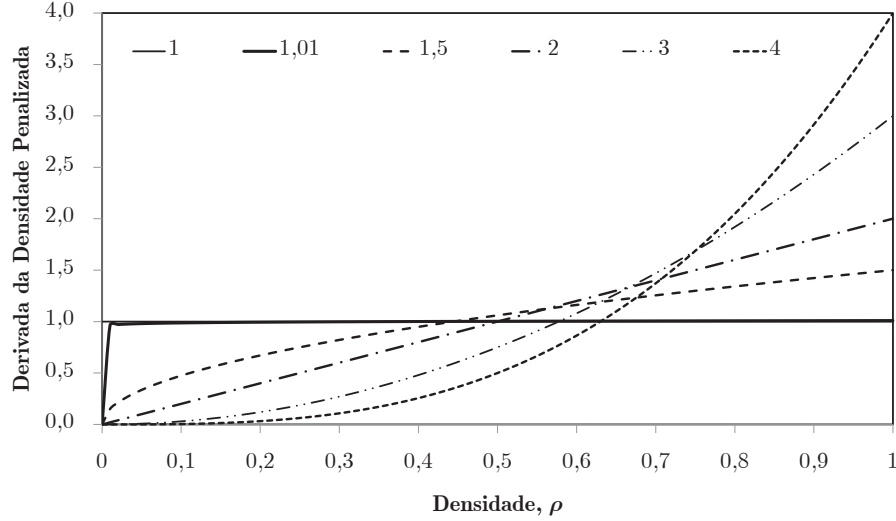


Figura 5.3: Representação derivada da função de penalização SIMP, considerando diferentes penalidades.

Em problemas com solicitações predefinidas, as derivadas dos carregamentos relativamente às variáveis de projecto são nulas e as sensibilidades são sempre negativas. Nestes casos, o comportamento da *compliance*, tanto estrutural quanto térmica, é monótono. Em contrapartida, quando existem solicitações dependentes das variáveis, o termo da sensibilidade dos carregamentos não desaparece e surge a contribuição de cada elemento finito para o vector de carregamento de acordo com a sua densidade. Assim, dependendo da magnitude deste termo de sensibilidade, o valor da derivada total pode alternar entre sinais com a evolução das variáveis. Neste caso, a *compliance* adquire um carácter não-monótono. Esta questão pode ser analisada recorrendo novamente à equação 5.25, de onde se tem que

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = 2\mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \rho} - \mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U}. \quad (5.41)$$

Considerando a existência de carregamentos prescritos  $\mathbf{F}_p$  e carregamentos dependentes da densidade  $\mathbf{F}_t$ , sendo  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_t$ , tem-se que

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = 2\mathbf{U}^T \frac{\partial (\mathbf{F}_p + \mathbf{F}_t)}{\partial \rho} - \mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U} = 2\mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{F}_t}{\partial \rho} - \mathbf{U}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho} \mathbf{U}, \quad (5.42)$$

resultando assim em duas parcelas de sinal contrário responsáveis pela eventual não-monotonia do problema. Neste trabalho, esta análise surge enquadrada na resolução de problemas com solicitações termomecânicas. Neste caso, para o elemento  $e$ , tem-se (*vd.* Cap. 4)

$$\mathbf{F}_t^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \beta(\rho_e) \Delta T d\Omega. \quad (5.43)$$

$\beta$  corresponde ao tensor dos módulos térmicos. Atendendo ao facto do tensor de elasticidade  $\mathbf{D}$  poder ser definido como

$$\mathbf{D}_e = \mathbf{D}(\rho) = \rho_e^p \mathbf{D}^0, \quad (5.44)$$

então [Li *et al.* 2010]

$$\beta_e = \beta(\rho) = \mathbf{D}(\rho) : \alpha(\rho) = (\rho_e^p \mathbf{D}^0) : (\rho_e^p \alpha^0) = \rho_e^{2p} (\mathbf{D}^0 : \alpha^0) = \rho_e^{2p} \beta^0, \quad (5.45)$$

onde  $\alpha$  corresponde ao tensor de expansibilidade térmica. Definindo, como grandeza auxiliar elementar

$$\mathbf{F}_{t0}^e = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^T \beta_0 \Delta T d\Omega, \quad (5.46)$$

tem-se que

$$\mathbf{F}_t^e = \rho_e^{2p} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^T \beta_0 \Delta T d\Omega = \rho_e^{2p} \mathbf{F}_{t0}^e. \quad (5.47)$$

Deste modo, a sensibilidade da componente de dilatação térmica à variação de densidade pode calcular-se como

$$\frac{\partial \mathbf{F}_t^e}{\partial \rho} = 2p \rho_e^{2p-1} \mathbf{F}_{t0}^e, \quad (5.48)$$

para o elemento finito  $e$ , se  $T$  for independente de  $\rho$ . Contudo, se a temperatura depender da distribuição de material, torna-se necessário contemplar ainda a sua sensibilidade também. Assim,

$$\frac{\partial \mathbf{F}_t^e}{\partial \rho} = 2p \rho_e^{2p-1} \mathbf{F}_{t0}^e + \rho_e^{2p} \frac{\partial \mathbf{F}_{t0}^e}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \rho}. \quad (5.49)$$

Esta complexidade adicional não afecta problemas com campos predefinidos de temperatura, ao contrário de problemas com actualização do campo de temperaturas em função da distribuição de material. É, no entanto, comum considerar-se esta componente de sensibilidade nula apesar da actualização térmica, melhorando a eficiência do processo de optimização sem deteriorar a precisão dos resultados [Xia e Wang 2008, Gao e Zhang 2010].

Atendendo ao descrito, o problema mecânico exposto na equação 5.14, considerando as solicitações termomecânicas, mantém-se idêntico. A sensibilidade da função-objectivo, considerando a sensibilidade da temperatura à variação de densidade como sendo nula e atendendo a que  $\mathbf{k}^e = \rho_e \mathbf{k}_0^e$ , pode escrever-se, para o elemento  $e$ , como

$$\frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} = 4p \rho_e^{2p-1} \mathbf{u}_e^T \mathbf{F}_{t0}^e - p \rho_e^{p-1} \mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e. \quad (5.50)$$

Note-se o carácter potencialmente não-monótono do problema. Refira-se ainda que no caso de se usar o tipo de interpolação mostrado na expressão 5.16, passa a ter-se que<sup>7</sup>

$$\begin{aligned} \beta_e &= [\{\rho_e^p + d_m(1 - \rho_e^p)\} \mathbf{D}_0] : [\{\rho_e^p + d_m(1 - \rho_e^p)\} \alpha_0] \\ &= \{\rho_e^p + d_m(1 - \rho_e^p)\}^2 \beta_0, \end{aligned} \quad (5.51)$$

pelo que a equação 5.50 corresponde a

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \rho} &= 4((1 - d_m)p \rho_e^{p-1}) \times (\rho_e^p + d_m(1 - \rho_e^p)) \mathbf{u}_e^T \mathbf{F}_{t0}^e \\ &\quad - ((1 - d_m)p \rho_e^{p-1}) \mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e. \end{aligned} \quad (5.52)$$

---

<sup>7</sup>Opta-se aqui por considerar a variável  $d_m$  como idêntica para as diversas propriedades, apesar de se poder igualmente assumir um valor independente para cada uma delas.

A particularidade deste problema é que os carregamentos térmicos dependem da rigidez e do coeficiente de expansão térmica do material. A estratégia de penalizar apenas a rigidez independentemente do coeficiente de expansão térmica poderia ser válida para material/vazio. No caso de dois materiais, no entanto, o modelo de interpolação deve poder variar simultaneamente o coeficiente de expansão térmica e a rigidez entre os dois constituintes [Gao e Zhang 2010]. Note-se ainda que os problemas com carregamentos dependentes da densidade tendem a ampliar os problemas do SIMP em regiões de densidade reduzida, relacionados com a derivada nula em  $\rho = 0$ , e levar a oscilações em torno da restrição de volume [Bruyneel e Duysinx 2004, Gao e Zhang 2010].

## 5.6 Métodos de Resolução

Face a outros problemas típicos de optimização, a optimização topológica apresenta um número elevado de variáveis de projecto, frequentemente da mesma ordem de grandeza do número de variáveis de análise do problema [Bendsøe e Sigmund 2003]. Neste sentido, é essencial o recurso a um correcto e eficiente método de resolução do problema de optimização. Nesta secção abordam-se resumidamente dois métodos bastante difundidos na resolução dos problemas apresentados neste trabalho, métodos de critério de óptimo (*optimality criteria* – OC) [Hassani e Hinton 1998c, Bendsøe e Sigmund 2003] e métodos de programação matemática como o Método das Assíptotas Móveis (MMA) de Krister Svanberg [Svanberg 1987] ou o CONLIN (*CONvex LINearization*) [Fleury e Braibant 1986, Fleury 1989].

Os métodos de critério de óptimo<sup>8</sup>, com grande afinidade com métodos duais, podem ser muito eficientes para problemas em que o número de restrições é reduzido quando comparado com o número de variáveis de projecto. Esta afirmação é particularmente relevante em problemas como os apresentados nas secções anteriores, onde na realidade existe apenas uma restrição (para além dos limites das próprias variáveis) [Haftka e Gürdal 1992]. Os métodos de OC com aplicação estrutural surgem nos anos 1960 [Prager 1968], sendo rapidamente expandidos para outras aplicações estruturais [Berke 1970, Venkayya 1978, Khot 1981] e actualmente bastante difundidos [Sigmund 2001]. Estes métodos baseiam-se usualmente em critérios de óptimo rigorosos, derivados a partir das condições necessárias de KKT (*vd.* Sec. 2.3.2), apesar de serem comuns alguns métodos mais intuitivos, como a densidade de energia de deformação uniforme na estrutura ou o chamado *fully stressed design*. Suportadas pelos critérios de óptimo, surgem regras de actualização heurísticas, de acordo com esquemas de ponto fixo usados em cada iteração. Os esquemas de actualização têm o objectivo de actualizar as variáveis que definem a estrutura, classificados usualmente de *resizing schemes*, de modo a respeitar os critérios de óptimo. Esta é, aliás, a razão pela qual estes são classificados de métodos indirectos, já que procuram satisfazer um conjunto de critérios em vez de optimizar directamente a função-objectivo, como nos métodos de programação matemática [Hassani e Hinton 1998c]. Em suma, estes métodos baseiam-se na determinação de critérios apropriados às condições do problema e no desenvolvimento de procedimentos iterativos para proceder à actualização das variáveis e a procura do óptimo. Retomando o problema genérico definido na expressão 2.1,

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a} \quad & \\ & g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p \\ & g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m \end{aligned} \tag{5.53}$$

as condições necessárias de KKT (*vd.* Eqs. 2.7, 2.8 e 2.9) traduzem condições de estacionariedade,

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\lambda}^{*T} \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}, \tag{5.54}$$

<sup>8</sup>A designação de métodos de critério de óptimo surge aqui como uma adaptação da terminologia inglesa *optimality criteria methods* (OC), em alternativa à designação métodos de critério de optimalidade.



condição de complementaridade ou folgas complementares

$$\lambda_j^* g_j(\mathbf{x}^*) = 0, \quad j = p+1, \dots, m, \quad (5.55)$$

e viabilidade dual

$$\lambda_j^* \geq 0, \quad j = p+1, \dots, m, \quad (5.56)$$

respectivamente, para além da viabilidade primal definida nas próprias restrições do problema. Note-se que, para problemas convexos, as condições necessárias são também suficientes. Considerando um problema com uma só restrição como definido nas secções anteriores, a equação 5.54 pode ser escrita como

$$-\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lambda \frac{\partial g}{\partial x_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (5.57)$$

de onde se pode retirar que

$$\lambda = -\frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}}{\frac{\partial g}{\partial x_i}}. \quad (5.58)$$

Mostra-se aqui que os multiplicadores de Lagrange funcionam como uma medida da rentabilidade da forma como a variável  $x_i$  afecta a restrição. O denominador mede o seu efeito na restrição e o numerador o seu custo efectivo. Enquanto que no óptimo todas as variáveis são igualmente rentáveis, sendo o multiplicador de Lagrange constante em todo o domínio, fora do ponto óptimo os custos da sua variação assumem influências diferentes [Haftka e Gürdal 1992]. As condições apresentadas conduzem ao estabelecimento de algoritmos que permitam o cálculo das variáveis não com a resolução directa das equações definidas nos critérios de óptimo, mas sim com recurso a esquemas de actualização. Tradicionalmente é neste ponto que as abordagens mais comuns aos métodos de critério de óptimo variam entre abordagens heurísticas e analíticas. Neste trabalho utilizam-se esquemas heurísticos de actualização das variáveis [Rodrigues *et al.* 2002, Bendsøe e Sigmund 2003], que serão definidos aquando da abordagem numérica deste texto. Mostra-se aqui, no entanto, um exemplo alternativo comum de esquema iterativo que pode ser definido directamente a partir das relações apresentadas. Reescrevendo a equação 5.58 de modo a que o multiplicador de Lagrange passe para o segundo membro e multiplicando ambos os membros da equação por  $x_i^\gamma$ , tem-se

$$x_i^\gamma = x_i^\gamma \left( -\frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}}{\lambda \frac{\partial g}{\partial x_i}} \right), \quad (5.59)$$

o que serve de base para um esquema de actualização de ponto fixo<sup>9</sup>, na iteração  $k$  [Haftka e Gürdal 1992, Belegundu e Chandrupatla 1999]

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} \left( -\frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}}{\lambda \frac{\partial g}{\partial x_i}} \right)^{\frac{1}{\gamma}}. \quad (5.60)$$

$\gamma$  é um parâmetro de controlo do tamanho do passo da iteração. Um valor elevado origina pequenas variações na actualização das variáveis, enquanto um valor reduzido permite variações maiores, mas pode acarretar problemas de convergência. Note-se ainda que este tipo de método recursivo requer ainda que o multiplicador de Lagrange seja também actualizado ao longo do processo iterativo. Esta actualização pode ser feita considerando a restrição como activa ( $\lambda > 0$ ) e a condição de

---

<sup>9</sup>É comum a resolução de equações não-lineares como problemas de ponto fixo ( $x_{k+1} = P(x_k)$ ). Uma solução  $x^*$  deste problema é chamada de ponto fixo [Kelley 1995].



estacionariedade da função lagrangiana relativamente ao multiplicador de Lagrange ( $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0$ ). Numa abordagem mais simples, pode também ser actualizado em função do processo iterativo de actualização das variáveis de modo a se garantir que a restrição é respeitada e está activa [Sigmund 2001].

No que diz respeito à utilização de métodos de programação matemática, mais especificamente métodos de aproximação convexa, o principal método utilizado neste trabalho é o método das assimptotas móveis [Svanberg 1987]. Este algoritmo, com diversas implementações gentilmente disponibilizadas pelo autor, mostra-se bastante versátil e eficiente, lidando com problemas de grandes dimensões e múltiplas restrições. Este tipo de método tem a virtude de permitir a aproximação do problema original por uma sequência de subproblemas convexos separáveis e mais simples — de forma semelhante a métodos de programação linear sequencial e quadrática sequencial (PLS e PQS) [Bendsøe e Sigmund 2003] —, com resoluções mais eficientes recorrendo a estratégias duais [Fleury 1989].

Defina-se, de acordo com Svanberg [Svanberg 1987], o problema  $Q$  de optimização como

$$\begin{aligned} Q : \quad & \min_{\mathbf{x}} \quad f_0(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a} \quad & f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (5.61)$$

iniciando-se a iteração  $k$  com base no valor actual  $\mathbf{x}^{(k)}$ . São então geradas funções de aproximação  $f_i^{(k)}$ , para  $i = 0, \dots, m$ , tais que

$$f_i^{(k)}(\mathbf{x}) = r_i^{(k)} + \sum_{j=1}^m \left( \frac{p_{ij}^{(k)}}{U_j^{(k)} - x_j} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j - L_j^{(k)}} \right). \quad (5.62)$$

Estas funções são construídas com a sensibilidade das funções originais e os parâmetros  $L_j$  e  $U_j$  (classificados como assimptotas móveis). Estes valores permitem ajustar a convexidade de cada subproblema e são actualizados em cada iteração, de acordo com a evolução das iterações anteriores, de modo que

$$L_j^{(k)} < x_j^{(k)} < U_j^{(k)}. \quad (5.63)$$

Por sua vez, os restantes parâmetros são definidos como

$$p_{ij}^{(k)} = \begin{cases} \left( U_j^{(k)} - x_j^{(k)} \right)^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_j} & \text{se } \frac{\partial f_i}{\partial x_j} > 0 \\ 0 & \text{se } \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \leq 0 \end{cases} \quad (5.64)$$

$$q_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \geq 0 \\ - \left( x_j^{(k)} - L_j^{(k)} \right)^2 \frac{\partial f_i}{\partial x_j} & \text{se } \frac{\partial f_i}{\partial x_j} < 0 \end{cases} \quad (5.65)$$

$$r_i^{(k)} = f_i(\mathbf{x}^{(k)}) - \sum_{j=1}^m \left( \frac{p_{ij}^{(k)}}{U_j^{(k)} - x_j^{(k)}} + \frac{q_{ij}^{(k)}}{x_j^{(k)} - L_j^{(k)}} \right). \quad (5.66)$$

As funções  $f_i^{(k)}$  constituem um subproblema  $Q^{(k)}$  convexo gerado e resolvido pelo método em cada nova iteração, e cuja solução serve de ponto de partida para a iteração seguinte, até haver convergência. Note-se que Krister Svanberg disponibiliza ainda uma versão do MMA para problemas não-monótonos, o *Globaly Convergent MMA* (GCMMA). Revisões e estudos comparativos desta família de métodos podem ser consultados nas referências [Zhang e Fleury 1997, Bruyneel et al. 2002, Bruyneel e Duysinx 2004]. De entre este tipo de métodos destaca-se ainda o método de linearização convexa (CONLIN) [Fleury e Braibant 1986, Fleury 1989], também utilizado neste trabalho. Este método é um caso particular do MMA, apesar de, em rigor, o MMA ter surgido posteriormente. Efectivamente, o MMA reduz-se ao CONLIN quando se anula a actualização das assimptotas, fixando-as em  $L_j = 0$  e  $U_j \rightarrow \infty$ .

Note-se ainda que a utilização de métodos de programação matemática permite uma maior flexibilidade dos procedimentos de optimização topológica desenvolvidos, visto não terem a dependência acentuada que nos métodos de critério de óptimo obriga muitas vezes à implementação de diferentes algoritmos para diferentes problemas [Bendsøe e Sigmund 2003].

## 5.7 Pós-Processamento de Resultados de Optimização Topológica

O pós-processamento dos resultados obtidos a partir de procedimentos de optimização topológica é um tópico de elevada importância. Para além do pós-processamento típico de problemas resolvidos com o MEF, realizado neste trabalho com recurso ao programa GiD<sup>®</sup> para a visualização dos diversos resultados, a optimização topológica pressupõe normalmente uma aproximação por uma geometria não-discretizada. A transição das soluções obtidas para geometrias definidas correspondentes a estruturas exequíveis e efectivamente óptimas pode originar algumas complexidades. Uma abordagem comum corresponde à aproximação das imagens *raster* com definições vectoriais. Este procedimento pode ser efectuado manualmente ou desenvolvendo procedimentos que façam a aproximação das distribuições obtidas recorrendo a funções matemáticas passíveis de serem utilizadas em CAD (*Computer-Aided Design*). Uma das formas mais imediatas de implementar este tipo de abordagem é recorrer a plataformas de cálculo numérico e analítico (*e.g.* Matlab<sup>®</sup>) que permitam a representação gráfica de distribuições de pontos e de funções, assim como a obtenção automática de curvas de nível ou de isovalores. Na figura 5.4 mostram-se, a título de exemplo, resultados de um pequeno programa implementado em Matlab (`TopPlot.m`) que aplica este tipo de abordagem em problemas 2-D de optimização topológica, permitindo a exportação vectorial das curvas obtidas para posterior processamento CAD.

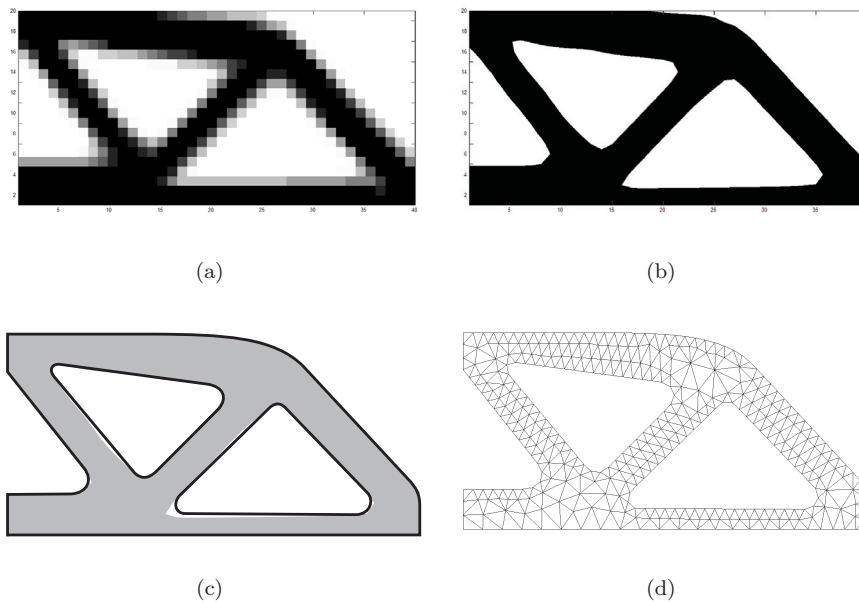


Figura 5.4: Pós-processamento de resultados de um problema bidimensional de optimização topológica: (a) resultados do problema de optimização topológica, (b) curvas de isovalores, (c) curvas suavizadas (CAD) e (d) malha de elementos finitos.

Uma outra abordagem a este problema, igualmente utilizada neste trabalho, surge associada

a metodologias de engenharia inversa e levantamento de forma [Dieter 2000]. Em áreas como o desenvolvimento de produto, é cada vez mais comum a engenharia inversa passar pelo levantamento de forma de geometrias físicas, de modo a se obter modelos virtuais representativos destas geometrias<sup>10</sup>. Este levantamento de forma, especialmente para geometrias complexas, passa pela medição das coordenadas de pontos notáveis da mesma. Esta medição é frequentemente realizada por tecnologias ópticas de varrimento (*e.g.* *3-D laser scanning*), resultando numa nuvem de pontos cujas coordenadas traduzem uma função discreta que aproxima a geometria do modelo. Esta nuvem de pontos é depois processada em programas CAD de modo a resultar em superfícies que a aproximem correctamente. Estas superfícies podem ser simplificadas, manipuladas e parametrizadas de modo a definirem a geometria pretendida. No contexto da optimização topológica, este tipo de metodologia permite uma grande flexibilidade em termos de concretização dos resultados obtidos, apesar de potencialmente morosa em termos de afinação. Assim, as coordenadas de nós ou pontos de Gauss podem ser utilizadas de forma idêntica às nuvens de pontos utilizadas nas metodologias de engenharia inversa referidas, em casos bi- ou tridimensionais. Deste modo, em casos de problemas de optimização discreta (*e.g.* problemas  $\{0,1\}$ ), mesmo que resultantes de versões relaxadas, os pontos de transição servem de base para a aproximação por curvas ou superfícies NURBS que permitem a modelação da geometria óptima. Nas figuras 5.5 mostram-se exemplos deste procedimento, para casos 2-D e 3-D.

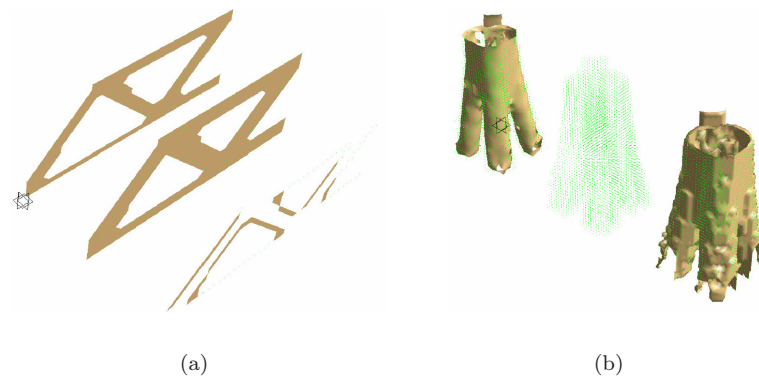


Figura 5.5: Exemplos (a) 2-D e (b) 3-D de pós-processamento de resultados de um problema de optimização topológica com base em técnicas de levantamento de forma e engenharia inversa a partir de núvens de pontos.

Note-se que após a modelação da geometria que aproxima os resultados da optimização topológica, é possível gerar a malha do problema em causa e realizar eventuais simulações sobre a geometria óptima. É ainda possível utilizar a nova definição paramétrica de óptimo para procedimentos de optimização de forma e assim refinar os resultados obtidos. Esta estrutura pode ser designada de Optimização Estrutural Integrada [Hassani e Hinton 1998b] e resume-se na figura 5.6.

---

<sup>10</sup>O levantamento de forma no contexto do desenvolvimento de produto e engenharia inversa é frequentemente designado de digitalização.



Figura 5.6: Representação esquemática de uma estrutura de procedimentos em optimização estrutural integrada.

## Capítulo 6

# Homogeneização por Expansão Assimptótica e Optimização Multiescala

*Resume-se a metodologia de homogeneização por expansão assimptótica e a sua utilização em procedimentos multiescala de optimização. Descrevem-se metodologias e estratégias alternativas de optimização de estrutura e material em cálculo estrutural.*

---

### 6.1 Introdução

A utilização de metodologias de homogeneização no estudo de materiais celulares e compósitos prende-se usualmente com a necessidade de reduzir o custo computacional dos problemas associados. Nesse sentido, a modelação detalhada das heterogeneidades do material que compõe uma determinada estrutura é substituída por um meio homogéneo equivalente, sustentado por leis de comportamento microestrutural obtidas a partir da análise de informação constitutiva calculada de acordo com o comportamento representativo de unidades heterogéneas de material. Estas unidades representativas são geralmente caracterizadas por apresentarem heterogeneidades cujas dimensões características se revelam bastante inferiores às dimensões características dos componentes estruturais em que são aplicadas. Se as características heterogéneas destes materiais se distribuem de um modo repetitivo ao longo do material, a sua morfologia pode ser aproximada pela repetição periódica de uma célula unitária representativa dos detalhes microestruturais do material.

Surge assim a metodologia de Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA) como uma técnica expedita de abordagem a problemas de modelação de fenómenos físicos em meios com estrutura periódica, em particular do comportamento termomecânico de componentes estruturais constituídos por materiais compósitos. Em termos numéricos, as principais vantagens desta metodologia consistem no facto de (i) conduzir a uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à modelação do comportamento termomecânico deste tipo de estruturas e (ii) permitir a caracterização dos campos microestruturais [Pinho-da-Cruz 2007]. Na realidade a obtenção de equações explícitas que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais

turais de fluxo superficial de calor por condução, de tensão e de deformação, num processo inverso classificado usualmente como localização.

Note-se que o conceito da homogeneização de propriedades físicas não é novo, existindo trabalhos pioneiros que datam século XIX [Poisson 1824, Maxwell 1873, Rayleigh 1892]. Os primeiros desenvolvimentos da teoria matemática da homogeneização, no entanto, surgem apenas final dos anos 60 do século XX [Spagnolo 1968, Sanchez-Palencia 1970, De Giorgi e Spagnolo 1973]. Depois destes surgiram diversos métodos de homogeneização como, por exemplo, a homogeneização por expansão assintótica [Bensoussan *et al.* 1978, Sanchez-Palencia 1980, Lions 1981, Bakhvalov e Panasenko 1989, Oleinik *et al.* 1992]. A HEA permite o cálculo de valores homogeneizados das propriedades termomecânicas de materiais com microestrutura periódica. No caso de materiais não-periódicos, será necessário recorrer a outras técnicas de homogeneização, tais como, por exemplo, a convergência-G [Spagnolo 1968] — para problemas simétricos e não-periódicos —, a convergência-H [Murat e Tartar 1997] — para problemas não-simétricos e não-periódicos — e a convergência- $\Gamma$  [Dal Maso 1993] — para problemas que admitem uma caracterização variacional. No entanto, estas técnicas não permitem o cálculo de propriedades equivalentes, apenas a obtenção de limites que enquadrem os respectivos valores homogeneizados. Destacam-se as seguintes referências como revisões de metodologias correntes de homogeneização [Kanouté *et al.* 2009, Pindera *et al.* 2009, Böhm 2012].

Por outro lado, a otimização topológica em cálculo estrutural trabalha com distribuições de material para obter a melhor resposta para um dado objectivo. A forma mais comum de otimização topológica estrutural, usada neste trabalho, corresponde a uma variedade de formas de minimizar a flexibilidade (*compliance*) ou maximizar a rigidez. Na análise de materiais compósitos e celulares, estas estratégias conduzem frequentemente a metodologias multiescala, quer como forma de relaxar o problema inicial (*vd.* Cap. 5) quer como forma de avaliar tanto a estrutura global como o material que a constitui. Neste sentido, a integração da HEA nos procedimentos de otimização topológica conduz a diversas abordagens distintas: otimização de uma estrutura constituída por um material com uma dada microestrutura; otimização da microestrutura para uma determinada aplicação estrutural; otimização simultânea de ambas as escalas; otimização do material (homogeneização inversa).

Um dos trabalhos pioneiros na relaxação do problema original discreto de otimização topológica, de Bendsøe e Kikuchi [Bendsøe e Kikuchi 1988], introduz a utilização da definição de microestruturas de material compósito para a definição da variação contínua de densidade no problema original. Os autores introduzem o método de homogeneização, onde as variáveis de otimização controlam as dimensões e a orientação de células representativas quadradas com furos quadrados numa microestrutura periódica. As propriedades locais dos materiais obtidos são avaliadas recorrendo a processos de homogeneização. Apesar da introdução do esquema de relaxação actualmente mais comum em otimização topológica estrutural, o SIMP [Bendsøe 1989, Rozvany *et al.* 1992], diversas aplicações multiescala têm sido utilizadas como forma de obter e justificar a variação contínua de densidade e a existência de valores intermédios. Uma das abordagens mais comuns corresponde a estratégias semelhantes à utilizada por Bendsøe e Kikuchi, com células representativas de geometria definida. Nestes casos, as variáveis de otimização são parâmetros característicos de inclusões ou furos definidos numa Célula Representativa Unitária (CRU), usualmente quadrangular ou circular, assim como a sua orientação [Bendsøe e Kikuchi 1988, Ma *et al.* 1995, Rodrigues e Fernandes 1995, Nishiwaki *et al.* 1998, Fernandes *et al.* 1999]. Note-se que, apesar de serem menos comuns, alguns trabalhos de otimização topológica recorrem a microestruturas triangulares ou hexagonais [Folgado *et al.* 1995, Hassani e Hinton 1999]. As propriedades equivalentes são obtidas por métodos de homogeneização. Outra abordagem corresponde ao recurso a laminados sequenciais do tipo *rank-N* [Thomsen 1992, Olhoff *et al.* 1993, Jacobsen 1998, Hassani e Hinton 1998a, Allaire e Aubry 1999]. Estes modelos correspondem a microestruturas definidas pela sobreposição em camadas de diferentes materiais e vazios, segundo  $N$  escalas. O material *rank-1*, por exemplo, é um laminado com camadas alternadas de sólido e vazio. Neste caso, para evitar problemas de singularidade na definição constitutiva do material, considera-se o vazio como um material de rigidez muito redu-

zida [Hassani e Hinton 1999]. Este material é a base para os materiais de *rank* superior. O *rank-2* é construído alternando um material *rank-1* e uma camada sólida. As orientações das camadas de diferentes *ranks* são ortogonais, repetindo-se esta conjugação para mais escalas. Este tipo de material permite a obtenção analítica das suas propriedades constitutivas. Tem, no entanto, o inconveniente de ser puramente teórico em termos de estrutura, não sendo exequível ao nível prático. Este é, aliás, um problema que afecta muitas vezes outro grupo de microestruturas utilizadas em procedimentos de optimização topológica multiescala, correspondente a materiais artificiais, isto é, sem topologia definida [Sigmund e Torquato 1997, Sigmund 2000, Rodrigues *et al.* 2002, de Kruijff *et al.* 2007, Coelho *et al.* 2008a, Kang *et al.* 2010]. Menos frequente que os modelos anteriores e potencialmente mais complexa, este tipo de metodologia permite a aplicação de estratégias de distribuição óptima de material ao nível das diferentes escalas. É assim possível obter uma variedade de microestruturas óptimas para as diferentes aplicações, como se verá ao longo deste trabalho. A maior liberdade em termos de topologia pode acarretar limitações em termos de exequibilidade das microestruturas obtidas, assim como a necessidade de procedimentos numéricos de homogeneização e recursos computacionais onerosos. Este tipo de metodologia permite, no entanto, aplicações segundo diferentes estratégias, com diversos tipos de avaliação multiescala ou com optimização do material exclusivamente ao nível da microescala.

Neste capítulo abordam-se os principais aspectos relativos à aplicação da técnica da homogeneização assimptótica ao problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada em regime linear (*vd.* Cap. 4). Mostram-se ainda a sua utilização de forma inversa, em processos de optimização topológica multiescala.

## 6.2 Homogeneização por Expansão Assimptótica

Os formalismos da metodologia da homogeneização por expansão assimptótica para o problema de termoelasticidade desacoplada quase-estática resumidos nas próximas secções baseiam-se na formulação forte apresentada por Pinho-da-Cruz [Pinho-da-Cruz 2007]. Para consultar informações mais detalhadas acerca dos fundamentos matemáticos e teóricos da metodologia de HEA, assim como formulações alternativas e suas aplicações, consultar ainda as referências [Guedes e Kikuchi 1990, Terada 1996, Chung *et al.* 2001, Oliveira *et al.* 2009a, Pinho-da-Cruz *et al.* 2009a, Pinho-da-Cruz *et al.* 2009b].

### 6.2.1 Formulação Diferencial dos Problemas Térmico e Termoelástico

Considere-se um material heterogéneo linear termoelástico associado a um meio sólido<sup>1</sup>  $\Omega \in \mathbb{R}^3$ , cuja microestrutura seja constituída pela distribuição espacialmente periódica de uma célula unitária associada a uma região  $Y$ , conforme ilustrado na figura 6.1. Uma vez que a generalidade dos materiais heterogéneos de microestrutura periódica apresenta uma relação  $\epsilon$  entre as dimensões características dos domínios da micro- e da macroestrutura reduzida ( $\epsilon \ll 1$ ), verifica-se que, aquando da solicitação termomecânica destes materiais, surgem oscilações periódicas dos campos resultantes de temperaturas, deslocamentos, fluxos superficiais de calor por condução, tensões ou deformações. Este tipo de oscilações advém da periodicidade associada à heterogeneidade microestrutural e manifesta-se na vizinhança de dimensão  $\epsilon$  de qualquer ponto de  $\Omega$ . Neste contexto, é natural assumir a existência de duas escalas distintas  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ , associadas, respectivamente, aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala  $\Omega$  e da microescala  $Y$ , tal como ilustrado na figura 6.1. Deste modo, resulta que as variáveis associadas aos campos anteriormente referidos passam a depender funcionalmente de ambos os sistemas  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ , em que

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}/\epsilon. \quad (6.1)$$

---

<sup>1</sup>O meio sólido ocupa o conjunto aberto  $\Omega \in \mathbb{R}^3$ , que se encontra delimitado pela fronteira  $\Gamma$  e cujo fecho corresponde a  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ .



Do exposto, resulta ainda que a dependência funcional em  $\mathbf{y}$  é periódica no domínio  $Y$ , sendo esta característica usualmente designada por  $Y$ -periodicidade.

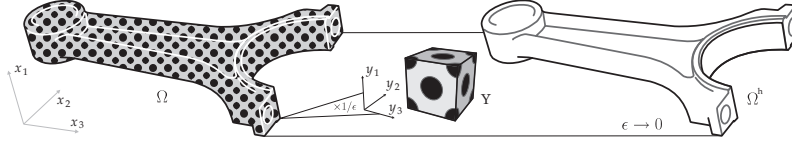


Figura 6.1: Representação esquemática do material termoelástico heterogêneo  $\Omega$  e da célula unitária  $Y$  associada à microescala, utilizados no processo de homogeneização assintótica, de que resulta, com  $\epsilon \rightarrow 0$ , o material homogêneo  $\Omega^h$ .

Em termos de propriedades lineares termoelásticas, a  $Y$ -periodicidade da heterogeneidade microestrutural reflecte-se no facto de os tensores de condutividade térmica  $\mathbf{k}$ , de expansibilidade térmica  $\boldsymbol{\alpha}$  e de elasticidade  $\mathbf{D}$  serem  $Y$ -periódicos em  $\mathbf{y}$ . Por outro lado, a homogeneidade do material ao nível da macroescala resulta na não-dependência directa destes tensores relativamente ao sistema de coordenadas da macroescala,  $\mathbf{x}$ . Neste contexto, em termos das componentes dos tensores de condutividade térmica, de expansibilidade térmica e de elasticidade, obtém-se<sup>2</sup>

$$k_{ij} = k_{ij}(\mathbf{y}), \quad (6.2)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}(\mathbf{y}) \quad \text{e} \quad (6.3)$$

$$D_{ijkl} = D_{ijkl}(\mathbf{y}), \quad (6.4)$$

respectivamente. No entanto, no sistema de coordenadas da macroescala,  $\mathbf{x}$ , a heterogeneidade microestrutural manifesta-se num período  $\epsilon^{-1}$  vezes menor que a dimensão característica do domínio  $Y$ . Este facto é denotado, de acordo com a equação 6.1, por

$$k_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) = k_{ij}(\mathbf{x}/\epsilon), \quad (6.5)$$

$$\alpha_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}) = \alpha_{ij}(\mathbf{x}/\epsilon) \quad \text{e} \quad (6.6)$$

$$D_{ijkl}^\epsilon(\mathbf{x}) = D_{ijkl}(\mathbf{x}/\epsilon), \quad (6.7)$$

em que o índice superior  $\epsilon$  evidencia o facto de  $\mathbf{k}$ ,  $\boldsymbol{\alpha}$  e  $\mathbf{D}$  serem  $\epsilon Y$ -periódicos no sistema de coordenadas da macroescala,  $\mathbf{x}$ , dependendo, assim, indirectamente de  $\mathbf{x}$ . Neste contexto, considerando a convenção de Einstein para a notação indicial das componentes das grandezas tensoriais, o problema térmico em regime estacionário é descrito por equações de equilíbrio e de Fourier para a condução de calor que correspondem [Cioranescu e Donato 1999], respectivamente, a

$$\frac{\partial q_i^\epsilon}{\partial x_i^\epsilon} - Q = 0 \quad \text{em } \Omega \quad \text{e} \quad (6.8)$$

$$q_i^\epsilon = -k_{ij}^\epsilon \frac{\partial T^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} \quad \text{em } \Omega, \quad (6.9)$$

para<sup>3</sup>  $i, j = 1, \dots, 3$ .  $q_i$  são as componentes do vector de fluxos superficiais de calor por condução.  $Q$  representa a taxa temporal de geração de calor por unidade de volume e  $T$  é o campo de temperaturas. O índice superior  $\epsilon$  evidencia a  $\epsilon Y$ -periodicidade de uma determinada variável no sistema de coordenadas da macroescala,  $\mathbf{x}$ . A fronteira de  $\Omega$  é definida, de modo disjunto, pelas

<sup>2</sup>No presente capítulo, de modo a tornar mais expedita a exposição da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica ao problema da termoelasticidade linear desacoplada utiliza-se a notação dita indicial para as componentes das grandezas tensoriais.

<sup>3</sup>No seguimento do presente capítulo considera-se implicitamente que quaisquer índices referentes à notação tensorial tomam valores no conjunto  $\{1, 2, 3\}$ .



superfícies  $\Gamma_{D_T}$ ,  $\Gamma_{N_T}$  e  $\Gamma_{R_T}$ . Estas superfícies encontram-se associadas a condições<sup>4</sup> de fronteira de Dirichlet, de Neumann e de Robin definidas por

$$T^\epsilon = \bar{T} \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_T}, \quad (6.10)$$

$$q_i^\epsilon n_i = -\bar{q} \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_T} \quad \text{e} \quad (6.11)$$

$$q_i^\epsilon n_i = h_c(T^\epsilon - T_\infty) \quad \text{em} \quad \Gamma_{R_T}, \quad (6.12)$$

respectivamente, em que  $\Gamma_{D_T} \cup \Gamma_{N_T} \cup \Gamma_{R_T} = \Gamma$  e  $\Gamma_{D_T} \cap \Gamma_{N_T} = \Gamma_{D_T} \cap \Gamma_{R_T} = \Gamma_{N_T} \cap \Gamma_{R_T} = \emptyset$ .  $\bar{T}$  e  $\bar{q}$  são valores prescritos de temperatura e de fluxo de calor por condução por unidade área, respectivamente.  $n_i$  são as componentes de um versor normal exterior às superfícies  $\Gamma_{N_T}$  ou  $\Gamma_{R_T}$ .  $h_c$  e  $T_\infty$  são o coeficiente de convecção e a temperatura do meio ambiente, respectivamente.

A resolução do problema térmico consiste na determinação do campo de temperaturas, que corresponde à solução  $T^\epsilon \in V_\Omega^0$  do problema variacional auxiliar

$$\int_\Omega k_{ij}^\epsilon \frac{\partial T^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} \frac{\partial v}{\partial x_i^\epsilon} d\Omega = \int_\Omega Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{N_T}} \bar{q} v d\Gamma - \int_{\Gamma_{R_T}} h_c (T^\epsilon - T_\infty) v d\Gamma, \quad \forall v \in V_\Omega^0, \quad (6.13)$$

em que  $V_\Omega^0$  é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em  $\Gamma_{D_T}$ .

Atenda-se ao facto de o material heterogéneo ser constituído por  $n > 1$  materiais homogéneos, pelo que, na realidade, o problema térmico consiste em  $n$  equações análogas à equação 6.8, associadas a condições de continuidade de temperatura e de fluxos superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios [Lewis *et al.* 1996]. No entanto, por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, estas equações serão omitidas no seguimento deste trabalho.

Por outro lado, assumindo deformações infinitesimais associadas a um processo quase-estático, o problema associado de termoelasticidade linear é descrito por equações de equilíbrio, relações deformações-deslocamentos linearizadas e relações constitutivas (lei de Duhamel-Neumann) que correspondem a [Cioranescu e Donato 1999]

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} + f_i = 0 \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (6.14)$$

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^\epsilon}{\partial x_j^\epsilon} + \frac{\partial u_j^\epsilon}{\partial x_i^\epsilon} \right) \quad \text{em} \quad \Omega \quad \text{e} \quad (6.15)$$

$$\sigma_{ij}^\epsilon = D_{ijkl}^\epsilon \varepsilon_{kl}^\epsilon - \Delta T^\epsilon \beta_{ij}^\epsilon \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (6.16)$$

respectivamente, em que

$$\Delta T^\epsilon = T^\epsilon - T_0 \quad \text{e} \quad (6.17)$$

$$\beta_{ij}^\epsilon = D_{ijkl}^\epsilon \alpha_{kl}^\epsilon = \beta_{ij}^\epsilon(\mathbf{x}/\epsilon). \quad (6.18)$$

$\sigma_{ij}$  e  $\varepsilon_{ij}$  são as componentes dos tensores das tensões de Cauchy e das deformações, respectivamente.  $f_i$  e  $u_i$  representam as componentes dos vectores de forças por unidade de volume e de deslocamentos, respectivamente.  $T_0$  é a temperatura de referência e  $\beta_{ij}$  são as componentes do tensor dos módulos térmicos. Note-se que se  $\Delta T^\epsilon = 0$  ou  $\beta_{ij}^\epsilon = 0$  se obtêm as relações constitutivas para o caso puramente mecânico de elasticidade linear. A fronteira de  $\Omega$  é definida, de modo disjunto, pelas superfícies  $\Gamma_{D_u}$  e  $\Gamma_{N_u}$ . Estas superfícies encontram-se associadas a condições de fronteira de Dirichlet e de Neumann definidas<sup>5</sup> por

$$u_i^\epsilon = \bar{u}_i \quad \text{em} \quad \Gamma_{D_u} \quad \text{e} \quad (6.19)$$

$$\sigma_{ij}^\epsilon n_j = \bar{t}_i \quad \text{em} \quad \Gamma_{N_u}, \quad (6.20)$$

<sup>4</sup>Devido à não-linearidade associada à radiação, este tipo de condição de fronteira não será abordada no seguimento do presente capítulo.

<sup>5</sup>Tal como para o problema térmico, é possível definir condições de fronteira de Robin para o problema de termoelasticidade, apesar de, sem perda de generalidade, não serem consideradas neste trabalho. Fisicamente, estas correspondem à existência de uma fundação elástica em contacto com a superfície  $\Gamma_{R_u}$  do meio sólido  $\bar{\Omega}$ .

respectivamente, em que  $\Gamma_{D_u} \cup \Gamma_{N_u} = \Gamma$  e  $\Gamma_{D_u} \cap \Gamma_{N_u} = \emptyset$ .  $\bar{u}_i$  e  $\bar{t}_i$  são valores prescritos de deslocamento e de força por unidade de área, respectivamente.  $n_j$  são as componentes de um versor normal exterior à superfície  $\Gamma_{N_u}$ .

A resolução do problema termoelástico consiste na determinação do campo de deslocamentos, que corresponde à solução  $\mathbf{u}^\epsilon \in V_\Omega^0$  do problema variacional auxiliar

$$\int_{\Omega} D_{ijkl}^\epsilon \frac{\partial u_k^\epsilon}{\partial x_l^\epsilon} \frac{\partial v_i}{\partial x_j^\epsilon} d\Omega = \int_{\Omega} (T^\epsilon - T_0) \beta_{ij}^\epsilon \frac{\partial v_i}{\partial x_j^\epsilon} d\Omega + \int_{\Omega} f_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{t}_i v_i d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V_\Omega^0, \quad (6.21)$$

em que  $V_\Omega^0$  é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em  $\Gamma_{D_u}$ .

De acordo com o que foi anteriormente referido, devido ao facto de o material heterogéneo ser constituído por  $n > 1$  materiais homogéneos, o problema de termoelasticidade linear consiste em  $n$  equações análogas à equação 6.14, associadas a condições de continuidade de deslocamento e de forças superficiais em quaisquer das interfaces entre os vários subdomínios. Nas aplicações apresentadas no presente trabalho, o número efectivo de materiais homogéneos que constituem o material heterogéneo depende da distribuição de densidade ao longo da microestrutura, segundo a aplicação da metodologia SIMP (*vd.* Sec. 5.3). Por uma questão de simplificação e sem perda de generalidade, estas equações serão omitidas no seguimento deste trabalho.

### 6.2.2 Problemas Térmico e Termoelástico Homogeneizados

Assumindo a existência de duas escalas distintas associadas aos fenómenos de comportamento do material nos níveis da macroescala  $\Omega$  e da microescala  $Y$ , a aproximação do campo de temperaturas e de deslocamentos (variáveis primárias) faz-se com base nas respectivas expansões assintóticas em  $\epsilon$ , ou seja,

$$T^\epsilon(\mathbf{x}) = T^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon T^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 T^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad \text{e} \quad (6.22)$$

$$u_i^\epsilon(\mathbf{x}) = u_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon u_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 u_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots, \quad (6.23)$$

em que  $T^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  e  $u_i^{(r)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , com  $r \in \mathbb{N}_0$ , são funções  $Y$ -periódicas em  $\mathbf{y}$ . Estas podem ser designadas como correctores de ordem  $r$  dos campos de temperaturas e deslocamentos, respectivamente. Atendendo à equação 6.1, recorrendo à regra da cadeia utilizada na derivação de funções, tem-se que

$$\frac{\partial \cdot}{\partial x_i^\epsilon} = \frac{\partial \cdot}{\partial x_i} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \cdot}{\partial y_i}. \quad (6.24)$$

Assim, substituindo a expansão assintótica do campo de temperatura (Eq. 6.22) nas equações de Fourier para a condução de calor (Eq. 6.9) e na lei de Duhamel-Neumann (Eq. 6.16), assim como a expansão assintótica dos deslocamentos (Eq. 6.23) nas relações deformação-deslocamento linearizadas (Eq. 6.15), obtém-se o problema termoelástico linearizado. O campo de temperaturas  $T^{(0)}$  é a solução do problema térmico homogeneizado

$$\frac{\partial \Xi_i}{\partial x_i} - Q = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (6.25)$$

$$T^{(0)} = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_{D_T}, \quad (6.26)$$

$$\Xi_i n_i = -\bar{q} \quad \text{em } \Gamma_{N_T}, \quad (6.27)$$

$$\Xi_i n_i = h_c (T^{(0)} - T_\infty) \quad \text{em } \Gamma_{R_T}, \quad \text{com} \quad (6.28)$$

$$\Xi_i = -k_{ij}^h \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_j} \quad \text{em } \Omega, \quad (6.29)$$

onde  $\Xi_i$  são as componentes dos campos macroestruturais homogeneizados de condução de calor e  $k_{ij}^h$  as componentes do tensor de condutividade térmica homogeneizada, definidas como

$$k_{ik}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y k_{ij}(\mathbf{y}) \left( I_j^k - \frac{\partial Y^k}{\partial y_j} \right) dY. \quad (6.30)$$

$I_j^k = \delta_{jk}$  é o delta de Kronecker e  $\Upsilon^k$  as componentes do tensor de deslocamentos termocaracterísticos [Pinho-da-Cruz 2007]. Estes são as soluções  $\Upsilon^k \in \tilde{V}_Y$  do problema variacional auxiliar microestrutural

$$\int_Y k_{ij} \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY = \int_Y k_{ik} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY, \quad \forall v \in \tilde{V}_Y, \quad (6.31)$$

onde  $\tilde{V}_Y$  é o conjunto das funções contínuas suficientemente regulares,  $Y$ -periódicas e com um valor médio<sup>6</sup> igual a zero em  $Y$ . A existência de valores médios nulos  $Y$  para as soluções das equações 6.31 é uma condição de unicidade para o tensor de deslocamentos termocaracterísticos  $\Upsilon$  [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992].

Por sua vez, o campo de deslocamentos  $u_i^{(0)}$  é a solução do problema homogeneizado de termoelasticidade

$$\frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial x_j} + b_i = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (6.32)$$

$$u_i^{(0)} = \bar{u}_i \quad \text{em } \Gamma_{D_u}, \quad (6.33)$$

$$\Sigma_{ij} n_j = \bar{t}_i \quad \text{em } \Gamma_{N_u}, \quad \text{com} \quad (6.34)$$

$$\Sigma_{ij} = D_{ijkl}^h \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_l} - \left( T^{(0)} - T_0 \right) \beta_{ij}^h \quad \text{em } \Omega, \quad (6.35)$$

em que  $\Sigma_{ij}$  são as componentes dos tensor de tensões macroestruturais homogeneizado.  $D_{ijkl}^h$  e  $\beta_{ij}^h$  são as componentes dos tensores homogeneizados de elasticidade e dos módulos térmicos, respectivamente,

$$D_{ijmn}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left( I_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) dY \quad \text{e} \quad (6.36)$$

$$\beta_{ij}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left[ \beta_{ij}(\mathbf{y}) - D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \right] dY. \quad (6.37)$$

$I_{kl}^{mn} = \delta_{km} \delta_{ln}$ , onde  $\delta_{ij}$  é o símbolo do delta de Kronecker.  $\chi_k^{mn}$  e  $\Psi_k$  são os componentes dos tensores característicos de deslocamentos mecânicos e termomecânicos, respectivamente [Pinho-da-Cruz 2007]. Estes campos são as soluções  $\chi_k^{mn} \in \tilde{V}_Y$  e  $\Psi_k \in \tilde{V}_Y$  do problema variacional auxiliar microestrutural

$$\int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y D_{ijmn} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \quad \text{e} \quad (6.38)$$

$$\int_Y D_{ijkl} \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_Y \beta_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall v_i \in \tilde{V}_Y, \quad (6.39)$$

onde  $\tilde{V}_Y$  é o conjunto de funções  $Y$ -periódicas, contínuas e suficientemente regulares, com um valor médio igual a zero em  $Y$ . A existência de valores médios nulos em  $Y$  para as soluções das equações 6.38 e 6.39, como já referido, é uma condição de unicidade para o tensor  $\chi$  do campo dos deslocamentos mecânicos característicos [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992] e para o tensor  $\Psi$  do campo de deslocamentos termomecânicos característicos.

Note-se que a utilização de duas escalas baseia-se no pressuposto de ocorrência de oscilações periódicas dos campos de temperaturas e deslocamentos como resultado da periodicidade dos detalhes heterogêneos encontrados na microestrutura. Estas oscilações devem sobrepor-se aos campos macroscópicos, onde as heterogeneidades características do material são aproximadas por um meio homogeneizado. Assim, as aproximações de primeira ordem dos campos de temperatura e deslocamento surgem como flutuações em torno de valores macroscópicos médios, como ilustrado na figura 6.2 para o campo de temperaturas.

<sup>6</sup>O valor médio de uma função  $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ,  $Y$ -periódica em  $Y$ , define-se como  $\langle \Phi \rangle_Y = \frac{1}{|Y|} \int_Y \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY$ .

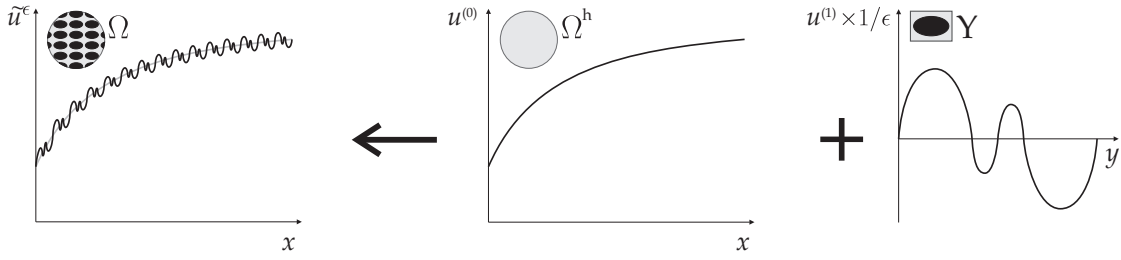


Figura 6.2: Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de temperaturas, para um caso unidimensional — o campo de temperaturas, em  $\Omega$ , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em  $\Omega^h$ , com as flutuações de primeira ordem advindas da  $Y$ -periodicidade do campo da microescala, em  $Y$ .

### 6.3 Metodologias de Homogeneização

Na prática, verifica-se que uma parte significativa das aplicações estruturais de engenharia baseadas em materiais heterogêneos de microestrutura periódica se encontra associada a valores de  $\epsilon \ll 1$ . Assim, verifica-se que as aproximações de primeira ordem dos campos de temperaturas e de deslocamentos se revelam adequadas para a representação dos campos de temperaturas  $T^\epsilon$  e de deslocamentos  $u_i^\epsilon$ , respectivamente. A não-consideração dos termos de correcção de ordem superior simplifica a metodologia de homogeneização por expansão assintótica, resultando na metodologia convencional de homogeneização [Terada 1996].

Atendendo ao exposto nas secções anteriores, a metodologia convencional de homogeneização consiste, em termos do problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada, numa técnica matemática rigorosa, com base na qual se substitui a resolução dos problema iniciais pela resolução de procedimentos de duas escalas. A informação constitutiva do problema global é determinada pelos coeficientes dos problemas homogeneizados, resultantes da solução dos problemas definidos numa célula da microescala, cujas fronteiras se encontram associadas a condições de fronteira de periodicidade.

Neste contexto e em termos numéricos, uma das principais vantagens desta metodologia consiste no facto de permitir uma redução bastante significativa do número de graus de liberdade associados à resolução do problema de termoelasticidade quase-estática desacoplada. De facto, esta técnica permite que a modelação das particularidades microestruturais seja efectuada com base numa única célula unitária, sendo, ainda, a macroescala modelada como se de um meio homogêneo se tratasse.

Outra vantagem relevante da aplicação do método de homogeneização por expansão assintótica ao problema de termoelasticidade desacoplada quase-estática consiste, como foi anteriormente referido, no facto de permitir a caracterização dos campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condução, de deformações e de tensões. Na realidade, ao contrário dos restantes métodos usuais de homogeneização, o método de homogeneização por expansão assintótica permite a obtenção explícita de equações que possibilitam a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de deformação e de tensão. Este processo, designado por localização, corresponde, em termos genéricos, ao processo inverso da homogeneização (*cf.* Fig. 6.3).

Considerando aproximações de primeira ordem, o campo microestrutural de fluxos superficiais de calor por condução associado à metodologia convencional de localização [Pinho-da-Cruz 2007] corresponde a

$$q_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k_{ij}(\mathbf{y}) \left( \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} - I_j^k \right) \frac{\partial T^{(0)}}{\partial x_k}. \quad (6.40)$$

Por outro lado, o campo microestrutural de deformação associado à metodologia convencional

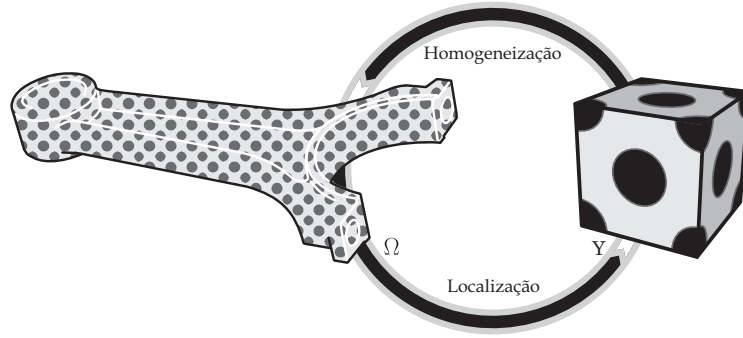


Figura 6.3: Ilustra  o esquem tica dos fluxos de informa  o associados  s t cnicas de homogeneiza  o e de localiza  o, que ocorrem entre a macroescala  $\Omega$  e a microescala  $Y$ .

de localiza  o define-se como

$$\varepsilon_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathfrak{S}_{ij}^{kl} \left[ \left( \mathbf{I}_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} (T^{(0)} - T_0) \right], \quad (6.41)$$

em que<sup>7</sup>

$$\mathfrak{S}_{ij}^{kl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (6.42)$$

Por sua vez, o campo microestrutural de tens es associado   metodologia convencional de localiza  o corresponde a

$$\sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = D_{ijkl}(\mathbf{y}) \left( \mathbf{I}_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) \frac{\partial u_m^{(0)}}{\partial x_n} + \left[ D_{ijkl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} - \beta_{ij}(\mathbf{y}) \right] (T^{(0)} - T_0). \quad (6.43)$$

As equa  es 6.40, 6.41 e 6.43 permitem obter, para um determinado ponto da macroescala  $\mathbf{x}$ , os valores aproximados dos campos de fluxos superficiais de calor por condu  o, de deforma  es e de tens es no seio da microestrutura heterog nea. Pelo contr rio, os campos macroestruturais homogeneizados de fluxos superficiais de calor por condu  o,  $\Xi_i$ , e de tens es,  $\Sigma_{ij}$ , ao corresponderem aos valores m dios, respectivamente, dos campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condu  o  $q_i^{(1)}$  e de tens es  $\sigma_{ij}^{(1)}$  em  $Y$ , revelam-se incapazes de representarem quaisquer flutua  es microestruturais dos campos correspondentes.

## 6.4 Optimiza  o Topol gica Multiescala

A optimiza  o topol gica, na forma apresentada neste trabalho, consiste na determina  o da distribui  o  ptima de material numa estrutura. Esta distribui  o, controlada por vari veis de densidade, oscila entre regi es de elevada densidade e densidade reduzida. Uma estrat gia para a relaxa  o do problema discreto inicial (*vd.* Sec. 5.3) consiste na utiliza  o de densidades interm dias, correspondentes a microestruturas de material celular ou comp sito. Esta processa-se em (pelo menos) duas escalas,   semelhan a do apresentado nas sec  es anteriores. Regularmente classificada de m todo de homogeneiza  o, tem sido aplicada segundo diversas implementa  es como forma de resolver o problema local [Bends e e Kikuchi 1988, Rodrigues e Fernandes 1995, Diaz e Lipton 1997, Theocaris e Stavroulakis 1998, Hassani e Hinton 1999, Theocaris e Stavroulakis

<sup>7</sup> $\mathfrak{S}_{ij}^{kl}$  correspondem, num referencial cartesiano ortonormado,  s componentes do tensor identidade n o-geral de quarta ordem  $\mathfrak{S}$ .

1999, Allaire 2002, Rodrigues *et al.* 2002, Bendsøe e Sigmund 2003, Guedes *et al.* 2006, Rodrigues 2006]. Esta metodologia remete a obtenção de distribuições discretas para a escala relativa à microestrutura do material, dando significado físico às regiões de cinzento na macroescala, *i.e.* na estrutura global. Neste sentido, nas secções seguintes apresenta-se uma metodologia designada de *multilevel* ou hierárquica [Theocaris e Stavroulakis 1998, Theocaris e Stavroulakis 1999, Rodrigues *et al.* 2002, Coelho *et al.* 2008a, Coelho *et al.* 2008b]. Neste trabalho, as metodologias multiescala de optimização topológica são utilizadas de diversas formas: optimização de uma estrutura constituída por um material com uma dada microestrutura; optimização simultânea de ambas as escalas; optimização do material (homogeneização inversa); optimização da microestrutura para uma determinada aplicação estrutural; optimização simultânea desacoplada de ambas as escalas; optimização microestrutural simultânea para diferentes subdomínios macroestruturais. Estas abordagens alternativas são ilustradas na figura 6.4.

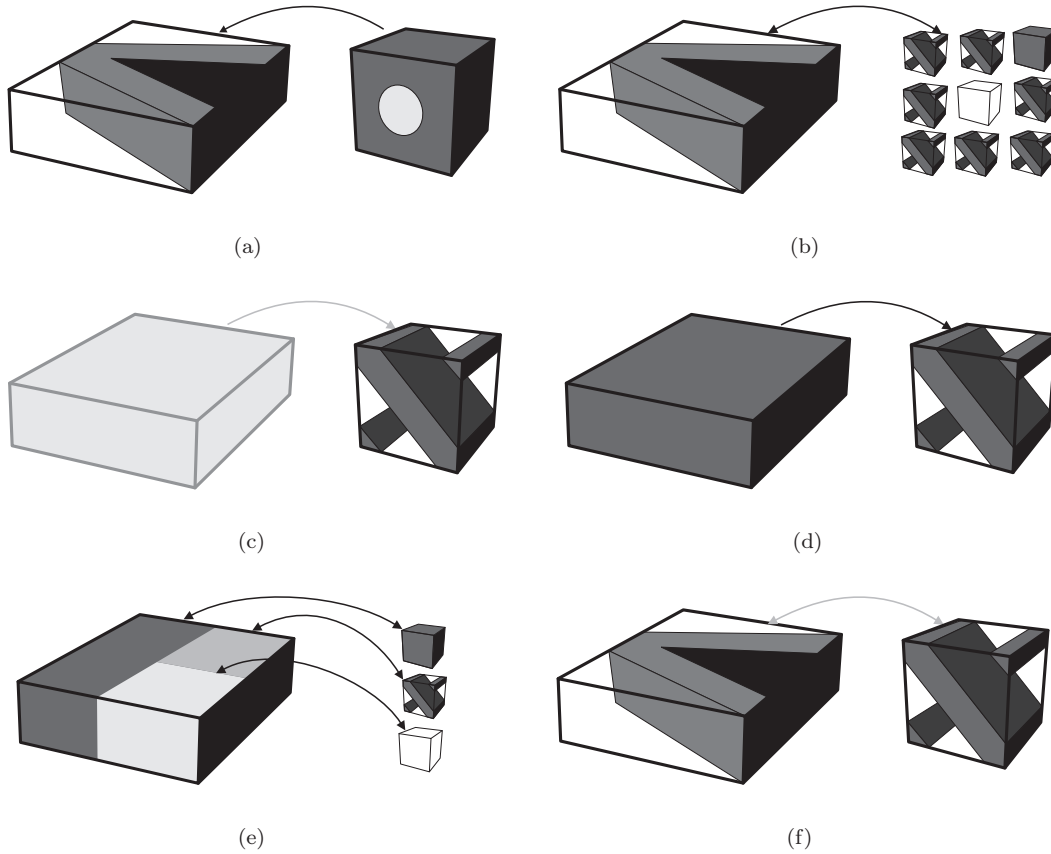


Figura 6.4: Ilustração de metodologias multiescala de optimização topológica: (a) optimização de uma estrutura constituída por um material com uma dada microestrutura, (b) optimização simultânea de ambas as escalas, (c) optimização do material (homogeneização inversa ou estratégia local), (d) optimização da microestrutura para uma determinada aplicação estrutural, (e) optimização microestrutural simultânea para diferentes subdomínios macroestruturais e (f) optimização simultânea desacoplada de ambas as escalas.

### 6.4.1 Formulação Hierárquica do Problema em Termoelasticidade

A optimização topológica estrutural visa tipicamente a minimização da flexibilidade (ou maximização da rigidez) de uma estrutura. Na sua forma mais corrente em elasticidade linear, procede-se à minimização da flexibilidade usando como medida o escalar obtido no cálculo da energia de deformação (*vd.* Sec. 5.2)

$$S = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho^p \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) d\Omega, \quad (6.44)$$

onde  $\rho = \rho(\mathbf{x})$  é o valor de densidade macroestrutural, ou no cálculo do trabalho realizado pelas forças externas

$$W = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma. \quad (6.45)$$

$\mathbf{b}$  e  $\bar{\mathbf{t}}$  correspondem às forças externas de volume e superfície, respectivamente. Estas duas grandezas podem ser usadas para definir a energia potencial total do sistema

$$P = S - W = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho^p \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) d\Omega - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right). \quad (6.46)$$

Segundo o princípio da energia potencial mínima, a energia potencial total é minimizada pelo campo de deslocamento  $\mathbf{u}$  que diz respeito ao equilíbrio e às condições de fronteira impostas.

Uma vantagem da utilização da energia potencial total como função-objectivo é que evidencia explicitamente a estrutura hierárquica da aplicação multiescala [Coelho 2009]. Assim, o problema de optimização hierárquica (*vd.* Fig. 6.4(b)) pode escrever-se como [Theocaris e Stavroulakis 1998, Theocaris e Stavroulakis 1999, Rodrigues *et al.* 2002, Bendsøe e Sigmund 2003, Bendsøe 1995]

$$\begin{aligned} \max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V}} \min_{\substack{\mathbf{u}^l \in U \\ l=1, \dots, L}} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^L) d\Omega \right. \\ \left. - \sum_{l=1}^L w_l \left( \int_{\Omega} \mathbf{b}^l \cdot \mathbf{u}^l d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}}^l \cdot \mathbf{u}^l d\Gamma \right) \right], \end{aligned} \quad (6.47)$$

onde  $\mathbf{u}$  é o campo de deslocamentos no equilíbrio, que minimiza a energia potencial. Esta minimização corresponde à resolução do problema de elementos finitos, que pode ser considerada como uma restrição de igualdade adicional.  $\rho$  é a variável de densidade macroscópica. A função-objectivo apresentada corresponde ao modo multicarregamento, com  $L$  modos de carga, cada um com um peso de ponderação  $w_l$ . A função de densidade de energia óptima  $\Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^L)$  corresponde à solução do problema local (microescala) e é definida como

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^L) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} \sum_{l=1}^L w_l \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}^l) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}^l) \right]. \quad (6.48)$$

Estes problemas correspondem a uma metodologia de dois problemas de optimização acoplados, também chamados de problema de optimização de distribuição de material e problema de anisotropia local. A dependência entre os dois problemas torna estes problemas não-lineares em termos constitutivos, ainda que definidos de base por comportamentos lineares [Bendsøe e Sigmund 2003]. A definição de multicarregamento omite-se a partir deste ponto de modo a tornar mais clara a apresentação da formulação. Será retomada sempre que conveniente, nomeadamente na apresentação de resultados.



Esta formulação, correspondente ao problema de elasticidade, pode ser expandida para o problema de termoelasticidade contemplando os termos de expansibilidade térmica. Assim, atendendo a que a energia de deformação passa a definir-se através da forma geral de Duhamel-Neumann da lei de Hooke (*cf.* Eq. 4.14) [Fung e Tong 2001]

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl}\varepsilon_{kl} - \beta_{ij}\Delta T, \quad (6.49)$$

a equação 6.48 pode reescrever-se como

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) - 2\beta_{ij}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \Delta T \right]. \quad (6.50)$$

O problema local resulta de um processo de localização<sup>8</sup>, onde se maximiza a densidade de energia de deformação local de acordo com o valor de deformação obtido como informação macroestrutural. Esta função divide-se em duas parcelas, a primeira relativa à densidade de energia de deformação elástica e a segunda relativa à densidade de energia de deformação termoelástica, nula no problema mecânico. Note-se que esta estrutura traduz dois problemas, em duas escalas distintas. Por um lado, o problema de cálculo estrutural global, onde se resolve o problema macroestrutural de elementos finitos e se procede à optimização topológica do problema relaxado, com a variável de densidade  $\rho(\mathbf{x})$ . Neste problema, utiliza-se informação constitutiva de cada um dos problemas locais. Nestes, por sua vez, informação macroestrutural localizada é utilizada para resolver um problema de optimização topológica em que a variável de densidade local  $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  se relaciona com a variável macroestrutural através das restrições locais de volume

$$\int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x}). \quad (6.51)$$

Por sua vez, cada um destes problemas dá origem a uma distribuição de material que, através de processos de homogeneização, fornecem as propriedades necessárias à resolução do problema externo. Utiliza-se neste trabalho a HEA para resolver o problema de homogeneização. Note-se, no entanto, que esta estrutura hierárquica pode ser utilizada com outras metodologias de homogeneização [Diaz e Lipton 1997, Theocaris e Stavroulakis 1998, Bendsøe e Sigmund 1999, Hassani e Hinton 1999, Theocaris e Stavroulakis 1999, Allaire 2002, Guedes *et al.* 2006, de Kruijff *et al.* 2007]. Assim, as matrizes constitutivas homogeneizadas  $D^h$  e  $\beta^h$  são obtidas com a homogeneização por expansão assintótica (*vd.* Eqs. 6.36 e 6.37). A diferença essencial relativamente à formulação habitual reside na definição das propriedades elementares na microescala. Em vez de se terem materiais constituintes distintos, passa a ter-se uma distribuição de material definida pela metodologia SIMP e as respectivas densidades elementares  $\mu$ . Assim,

$$D_{e_y} = D(\mu_{e_y}) = \mu_{e_y}^p D^0 \quad (6.52)$$

e

$$\beta_{e_y} = \beta(\mu_{e_y}) = \mu^p D^0 \mu^p \alpha^0 = \mu_{e_y}^{2p} \beta^0. \quad (6.53)$$

Resulta então que as equações 6.36 e 6.37 passam a escrever-se

$$D_{ijmn}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{ijkl}(\mu) \left( I_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) dY \quad \text{e} \quad (6.54)$$

$$\beta_{ij}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( \beta_{ij}(\mu) - D_{ijkl}(\mu) \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \right) dY. \quad (6.55)$$

---

<sup>8</sup>Distingue-se o processo aqui utilizado da localização definida no contexto da homogeneização por expansão assintótica, específicas desta metodologia.



Refira-se que a equação 6.54 pode também escrever-se na forma variacional (quadrática) [Bendsøe 1995] como

$$D_{ijmn}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y D_{pqkl}(\mu) \left( \Gamma_{pq}^{ij} - \frac{\partial \chi_p^{ij}}{\partial y_q} \right) \left( \Gamma_{kl}^{mn} - \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \right) dY. \quad (6.56)$$

Estas alterações em termos de propriedades locais, com a influência das variáveis de densidade local, devem ser estendidas às equações que definem os problemas locais de homogeneização e permitem o cálculo dos correctores correspondentes (*vd.* Eqs. 6.30, 6.36 e 6.37).

Convém ainda salientar que o problema de optimização hierárquica pode também escrever-se como

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} D_{ijkl}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega \right], \quad (6.57)$$

correspondente à minimização da energia de deformação elástica, sendo equivalente, no equilíbrio, à minimização do trabalho das forças externas. Refira-se que a maximização da energia potencial total mínima corresponde no caso termoelástico à minimização da energia de deformação elástica e não da energia de deformação total. De facto, a parcela da energia de deformação termoelástica faz parte da componente de trabalho das forças externas. Note-se ainda que o factor 1/2 pode ser omitido da formulação, visto alterar apenas o valor da função-objectivo no óptimo, mas nada mais acerca da solução [Rao 2009].

### 6.4.2 Condições de Óptimo

Para definir as condições necessárias de óptimo para o problema de optimização hierárquica é necessário definir o problema de uma forma adequada à sua implementação numérica. Assim, segundo Rodrigues *et al.* [Rodrigues *et al.* 2002], o lagrangiano aumentado (*vd.* Sec. 2.4.2.3) do problema global 6.47 pode definir-se como

$$\mathcal{L} = \min_{\mathbf{u} \in U} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}) d\Omega - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \right] - \frac{1}{2c} \left\{ \left[ \max \left\{ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right\} \right]^2 - \Lambda^2 \right\}, \quad (6.58)$$

onde  $c$  é o parâmetro de penalidade e  $\Lambda \geq 0$  é o multiplicador de Lagrange associado à restrição global de desigualdade. Tomando  $\tilde{\mathbf{u}}$  como o campo de deslocamentos que é solução do problema de equilíbrio global, a condição de estacionariedade relativamente à variável de optimização  $\rho(\mathbf{x})$  define-se como

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \Phi(\rho, \tilde{\mathbf{u}})}{\partial \rho} = \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (6.59)$$

em pontos onde  $\rho$  tem valores intermédios ( $\rho \in ]0, 1[$ ). Nos extremos, a condição passa a ser definida com uma desigualdade ( $\leq$  quando  $\rho = 0$  e  $\geq$  quando  $\rho = 1$ ) [Rodrigues *et al.* 2002, Coelho 2009]. Note-se, no entanto, que estes extremos correspondem a pontos onde não é necessário resolver o problema local, correspondendo respectivamente ao material original ( $\mathbf{D} = \mathbf{D}^0$ ) ou à ausência de material ( $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ ). Por sua vez, a estacionariedade relativamente ao multiplicador de Lagrange conduz a

$$\Lambda = \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right]. \quad (6.60)$$

A condição 6.60 implica o cumprimento da restrição global de volume. Por sua vez, a condição 6.59 traduz a estabilidade do multiplicador de Lagrange  $\Lambda$  no equilíbrio e na solução óptima, significando neste caso que a derivada da função densidade de energia relativamente às densidades globais é constante para qualquer  $\mathbf{x}$  (com  $0 < \rho < 1$ ) [Rodrigues *et al.* 2002, Coelho *et al.* 2008b].

A função lagrangiana do problema local (Eq. 6.50), por sua vez, pode escrever-se como

$$\mathcal{L} = \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) - 2 \beta_{ij}^h(\mu) \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \Delta T \right] - \lambda(\tilde{\mathbf{x}}) \left[ \int_{Y(\tilde{\mathbf{x}})} \mu dy - \rho(\tilde{\mathbf{x}}) \right]. \quad (6.61)$$

Este lagrangiano é definido em cada  $\mathbf{x} \in \Omega$  e o multiplicador  $\lambda$  é associado à restrição de volume local, que relaciona os campos de densidade local  $\mu$  com o valor global de densidade em cada ponto ( $\rho(\mathbf{x})$ ). Por sua vez,  $\varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}})$  são as componentes do campo de deformação associado aos deslocamentos  $\tilde{\mathbf{u}}$  no equilíbrio em  $\tilde{\mathbf{x}}$ . À semelhança do realizado com o lagrangiano global, define-se a condição de estacionariedade relativamente à variável microestrutural  $\mu$  como [Rodrigues e Fernandes 1995]

$$\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu} \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) - 2 \frac{\partial \beta_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu} \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \Delta T = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}), \quad (6.62)$$

$\forall \mathbf{y} \in Y(\tilde{\mathbf{x}}), \text{ com } 0 < \mu < 1,$

onde

$$\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu} = \frac{1}{|Y|} \int_Y p \mu^{p-1} D_{pqrs}^0 \left( \delta_{rk} \delta_{sl} - \frac{\partial \chi_r^{kl}}{\partial y_s} \right) \left( \delta_{pi} \delta_{qj} - \frac{\partial \chi_p^{ij}}{\partial y_q} \right) dY \quad (6.63)$$

e

$$\frac{\partial \beta_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left( 2p \mu^{2p-1} D_{ijkl}^0 \alpha_{kl}^0 - p \mu^{p-1} D_{ijkl}^0 \frac{\partial \Psi_k}{\partial y_l} \right) dY \quad (6.64)$$

correspondem às sensibilidades dos tensores homogeneizados de elasticidade,  $D^h$ , e dos módulos térmicos,  $\beta^h$ , respectivamente, relativamente à variação de  $\mu$ . Tal como no problema global, nos extremos estas condições tomam as desigualdades descritas anteriormente. A condição definida em 6.62 deve ser satisfeita, para cada  $x$  em  $\Omega$ , em qualquer  $y$  da célula unitária.

O lagrangiano 6.61 corresponde ao problema local definido pela função-objectivo  $\Phi(\rho, \tilde{\mathbf{u}})$  (*vd.* Eq. 6.48) no ponto óptimo. Estabelecendo a condição de estacionariedade relativamente à densidade global  $\rho$ , verifica-se que no óptimo  $\tilde{\mathbf{x}}$

$$\frac{\partial \Phi(\rho, \tilde{\mathbf{u}})}{\partial \rho} = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \forall \tilde{\mathbf{x}} \in \Omega. \quad (6.65)$$

Substituindo na equação 6.59 verifica-se que

$$\lambda(\mathbf{x}) = 2 \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \text{com } 0 < \rho < 1. \quad (6.66)$$

Note-se que, enquanto  $\lambda(\mathbf{x})$  é uma função, o segundo membro da equação anterior é constante em  $\Omega$  ( $0 < \rho < 1$ ) [Coelho 2009]. Assim, verifica-se que, no ponto óptimo, o multiplicador de Lagrange da restrição local será constante em todo o domínio macroestrutural. Associando os resultados anteriores, verifica-se ainda que condição de estacionariedade 6.62 pode ser ainda escrita como

$$\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu} \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) - 2 \frac{\partial \beta_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu} \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \Delta T = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}) = 2\Lambda, \quad (6.67)$$

$\forall \mathbf{y} \in Y(\tilde{\mathbf{x}}), \text{ com } 0 < \mu < 1,$

relacionando assim as condições de óptimo das diferentes escalas.

Note-se ainda que o método do lagrangiano aumentado tem como iteração principal a correspondente à perspectiva dual, controlado pela actualização dos multiplicadores de Lagrange. Neste sentido, a equação 6.60 corresponde a

$$\Lambda_{t+1} = \max \left[ 0, \Lambda_t + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right]. \quad (6.68)$$

No ponto óptimo,  $\Lambda_{t+1}$  será constante em todo o domínio e igual a  $\Lambda_t$  o que, para uma condição de igualdade, corresponde a ter  $\int_{\Omega} \rho d\Omega = V$ .

### 6.4.3 Problema Térmico

A abordagem hierárquica apresentada pode ser directamente adaptada ao problema térmico em regime estacionário. Note-se que em regime quase-estático os problemas térmico e elástico são formalmente equivalentes. Por um lado, ambos são regidos por um problema matemático (elíptico) típico de conservação, complementado por equações específicas constitutivas e de compatibilidade, assim como de condições de fronteira [Cioranescu e Donato 1999]. Por outro lado, os objectivos das aplicações apresentadas são a maximização de uma constante constitutiva de proporcionalidade que rege o problema, isto é, rigidez e condutividade. Assim, recorrendo à forma apresentada na relação 6.57, o problema de minimização da *compliance* térmica (ou maximização da condutividade) pode ser definido como

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T} = \mathbf{q}}} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Theta(\rho, \mathbf{T}) d\Omega \right], \quad (6.69)$$

onde

$$\Theta(\rho, \mathbf{T}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{x}, \mathbf{Y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{Y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{Y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} \left[ k_{ij}^h(\mu) T_i' T_j' \right], \quad \text{com} \quad T_k' = \frac{\partial T}{\partial x_k}. \quad (6.70)$$

A função  $\Theta$  é análoga à função energia de deformação, utilizada no problema térmico, e encontra-se associada ao princípio das temperaturas virtuais, por sua vez análogo ao princípio dos deslocamentos virtuais [Cook *et al.* 1989, Bathe 1996]. Esta função é usada como uma medida da *compliance* térmica e usada aqui para a maximização da condutividade térmica do ponto  $\mathbf{x}$  da macroestrutura  $\Omega$ .  $T_k'$  e  $k_{ij}^h$  correspondem aos gradientes térmicos e aos coeficientes da matriz dos coeficientes de condutividade térmica homogeneizada, respectivamente. Esta matriz, definida na equação 6.30, corresponde, com a influência das densidades locais, a

$$k_{ik}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y k_{ij}(\mu) \left( I_j^k - \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \right) dY, \quad (6.71)$$

com

$$k_{ey} = k(\mu) = \mu^p k^0. \quad (6.72)$$

A equação 6.71 pode também escrever-se na forma quadrática

$$k_{ik}^h = \frac{1}{|Y|} \int_Y k_{lj}(\mu) \left( I_l^i - \frac{\partial \Upsilon^i}{\partial y_l} \right) \left( I_j^k - \frac{\partial \Upsilon^k}{\partial y_j} \right) dY. \quad (6.73)$$

A definição do problema de otimização e as condições de óptimo são idênticas ao apresentado nas secções anteriores. Importa, no entanto, definir a sensibilidade do tensor homogeneizado de condutividade térmica relativamente à variação de  $\mu$  como

$$\frac{\partial k_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu} = \frac{1}{|Y|} \int_Y p \mu^{p-1} k_{rs}^0 \left( \delta_{ri} - \frac{\partial \Upsilon^i}{\partial y_r} \right) \left( \delta_{sj} - \frac{\partial \Upsilon^j}{\partial y_s} \right) dY. \quad (6.74)$$

Neste trabalho, este problema pode ser resolvido de forma isolada ou numa abordagem multiobjectivo. Neste caso, os problemas térmico e mecânico são resolvidos como [de Kruijf *et al.* 2007, Challis *et al.* 2008, Chen *et al.* 2010]

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}\mathbf{u}=\mathbf{f} \\ \mathbf{K}_T\mathbf{T}=\mathbf{q}}} \left[ w_t \frac{f_t}{f_t^0} + w_m \frac{f_m}{f_m^0} \right], \quad (6.75)$$

onde  $f_t$  e  $f_m$  são objectivos térmicos e mecânicos, respectivamente. Os valores  $f_t^0$  e  $f_m^0$  correspondem a termos de normalização, tipicamente o valor de cada um dos objectivos na estimativa inicial, e os valores  $w$  são aos pesos de cada um dos objectivos. A manipulação destes pesos dá origem a análises de Pareto (*vd.* Sec. 2.4.4), sendo aqui definidos como  $w_m = 1 - w_t$ , com  $w_t \in [0, 1]$  [Frischknecht *et al.* 2011].

## 6.5 Homogeneização Inversa

A metodologia apresentada nas secções anteriores, devido à clara separação do problema em duas escalas distintas, permite o recurso ao problema interno para efectuar optimização local. Assim, é possível obter microestruturas de materiais compósitos ou celulares óptimos para responder a valores de campo distante (*far-field*). Este tipo de problema é frequentemente designado de problema local anisotrópico e a metodologia de homogeneização inversa (*vd.* Fig. 6.4(c)) [Sigmund 1994].

A definição deste problema, equivalente ao problema local da estrutura hierárquica anterior (*vd.* Eqs. 6.48 e 6.70), pode escrever-se como

$$\Phi(\mu, \bar{\varepsilon}, \bar{\Delta T}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V}} \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \bar{\varepsilon}_{ij} \bar{\varepsilon}_{kl} - 2\beta_{ij}^h(\mu) \bar{\varepsilon}_{ij} \bar{\Delta T} \right], \quad (6.76)$$

ou

$$\Theta(\mu, \bar{\mathbf{T}}') = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V}} \left[ k_{ij}^h(\mu) \bar{T}'_i \bar{T}'_j \right], \quad (6.77)$$

consoante se trate de um problema de termoelasticidade ou térmico, respectivamente.  $\bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{\Delta T}$  e  $\bar{\mathbf{T}}'$  são campos impostos de deformação, variação de temperatura e gradiente térmico, respectivamente. Os objectivos são maximizar a rigidez e maximizar a condutividade térmica do material obtido. À semelhança do caso hierárquico, estes problemas podem ser resolvidos em modo multicarregamento e multiobjectivo.

Para além da estrutura hierárquica apresentada anteriormente, a homogeneização inversa pode ser utilizada de forma isolada ou integrada noutros modos de cálculo. Uma das formas desenvolvidas neste trabalho corresponde à sua integração num modo de cálculo multiescala, com optimização apenas ao nível da microescala (*vd.* Fig. 6.4(d)). Neste caso, em vez de serem impostos valores prescritos de deformação macroestrutural, o problema de optimização inversa é controlado pelo

comportamento do problema homogeneizado da macroescala. Em cada iteração, os resultados macroestruturais são ponderados de forma a actualizar o tensor de deformações que controla o comportamento do problema de optimização. Este problema pode ser formulado como (*vd.* Eq. 6.47)

$$\min_{\mathbf{u} \in U} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Phi(\mathbf{u}) d\Omega - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \right], \quad (6.78)$$

com

$$\Phi(\mathbf{u}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V}} \left[ \langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) - 2 \langle \beta_{ij}^h(\mu) \rangle \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \Delta T \right]. \quad (6.79)$$

Neste caso, à semelhança das estratégias hierárquicas,  $\varepsilon(\mathbf{u})$  e  $\Delta T$  são calculados a partir da distribuição de cada uma das grandezas na macroescala. No entanto, as propriedades constitutivas  $\langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle$  e  $\langle \beta_{ij}^h(\mu) \rangle$  são constantes em toda a estrutura, correspondendo a uma fracção volúmica constante e a uma única topologia microestrutural óptima. Neste caso, as diferenças face às metodologias hierárquicas diferem no cálculo de sensibilidades locais. Em vez de se considerar cada um dos problemas locais de forma isolada, calculam-se as sensibilidades locais considerando um único problema microestrutural segundo diversas alternativas como, por exemplo, médias ponderadas dos campos macroestruturais ou recorrendo aos valores menos favoráveis em toda a estrutura. Procura-se aqui a estrutura mais rígida, actuando apenas sobre a microescala e optimizando uma microestrutura única e periódica para uma macroescala homogeneizada. Refira-se que este tipo de estrutura permite ainda que a optimização microestrutural seja feita segundo subdomínios da macroescala (*vd.* Fig. 6.4(e)), conduzindo a um número predefinido de microestruturas óptimas [Bendsøe 1995, Cherkaev *et al.* 1998]. Com uma formulação semelhante ao caso hierárquico apresentado neste capítulo, esta metodologia encontra-se resumida no Apêndice B.

Outro modo de cálculo que foi desenvolvido neste trabalho corresponde à utilização de uma estrutura de optimização multiescala desacoplada, conjugando a formulação de homogeneização inversa com optimização macroestrutural (*vd.* Fig. 6.4(f)). Neste caso, no entanto, ao contrário da estrutura hierárquica apresentada anteriormente, as variáveis de densidade macroestrutural e microestrutural não dependem uma da outra, apesar de os dois problemas serem funcionalmente dependentes. Esta estratégia desacoplada<sup>9</sup> pretende obter simultaneamente uma macroestrutura discreta ( $\rho \in \{0, 1\}$ ) e uma microestrutura discreta única e ideal para definir o material de que é feita a estrutura ( $\mu \in \{0, 1\}$ ). Assim, em vez da microestrutura variar ao longo da estrutura global, será constante e corresponderá, por exemplo, ao material compósito de que deverá ser feita. A formulação deste problema pode definir-se como

$$\max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V_M}} \min_{\mathbf{u} \in U} \left[ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}) d\Omega - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \right], \quad (6.80)$$

com

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V_m}} \left[ \rho^p \langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) - 2 \rho^{2p} \langle \beta_{ij}^h(\mu) \rangle \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \Delta T \right], \quad (6.81)$$

utilizando as mesmas alternativas de ponderação mostradas anteriormente, acrescidas da questão de existência ou não de material na macroestrutura. Assim, independentemente da opção de ponderação utilizada, cada parcela é ainda afectada pela densidade macroestrutural correspondente.

<sup>9</sup>Embora esta estratégia seja aqui classificada como desacoplada, mantém aquilo a que se pode chamar um acoplamento fraco. Apesar das variáveis de optimização macro- e microestruturais deixarem de ser directamente dependentes, os problemas de ambas as escalas continuam a ter dependência constitutiva.

Significa assim que, no limite, a ponderação é feita apenas com as regiões da estrutura onde efectivamente existe material.  $V_M$  e  $V_m$  correspondem às fracções volúmicas pretendidas para o problema macroestrutural e para o problema microestrutural, respectivamente, podendo os domínios serem sujeitos a restrições de volume independentes. O facto de estas restrições serem independentes, com a restrição local a não ser definida em função da densidade global, leva a que o acoplamento fraco característico deste problema se verifique também nas condições de óptimo definidas anteriormente para o problema geral hierárquico (*vd.* Sec. 6.4.2). A abordagem geral do problema desacoplado pode ser semelhante ao apresentado para o problema hierárquico, mas a condição 6.65 deixa de ser válida. Isto tem reflexo directo na condição de estacionariedade definida na expressão 6.67, onde se perde a relação entre os multiplicadores de Lagrange das restrições global e local. As condições de óptimo de ambas as escalas passam a ser independentes, resultando no carácter desacoplado deste problema de optimização.

Note-se que estes tipos de metodologia podem ainda ser aplicados ao problema térmico segundo os mesmos princípios. Existe ainda a possibilidade de ser utilizado em conjunto com a estratégia de optimização local que se apresenta em seguida, apesar de ser uma solução menos eficiente.

## 6.6 Optimização Local

Existem diversas metodologias para obter a distribuição óptima de material para uma dada aplicação em análise estrutural. Uma abordagem também utilizada neste trabalho para a optimização local do material (*vd.* Fig. 6.4(c)), como alternativa à homogeneização inversa, corresponde a uma definição mais comum do problema de optimização topológica. Neste caso, procede-se à minimização do trabalho realizado pelas forças externas (minimização da *compliance*), numa metodologia semelhante à utilizada no problema de optimização macroestrutural apresentado na Secção 5.2. Assim, este problema pode definir-se como

$$\min_{\substack{0 \leq \mu \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \bar{\rho} \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \left[ \int_{\Omega} \Delta T \beta : \varepsilon(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right] \quad (6.82)$$

ou, usando a implementação prática comum, expressa em notação matricial [Sigmund 2001], como

$$\min_{\substack{0 \leq \mu \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \bar{\rho} \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \int_{\Omega} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} d\Omega, \quad (6.83)$$

para o caso termoelástico, e

$$\min_{\substack{0 \leq \mu \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \bar{\rho} \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T} = \mathbf{q}}} \int_{\Gamma_{N_T}} \bar{q} T d\Gamma, \quad (6.84)$$

ou, usando a implementação prática comum expressa em notação matricial, como

$$\min_{\substack{0 \leq \mu \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \bar{\rho} \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T} = \mathbf{q}}} \int_{\Omega} \mathbf{T}^T \mathbf{K}_T \mathbf{T} d\Omega \quad (6.85)$$

para o problema térmico [de Kruijf *et al.* 2007]. A principal diferença desta aplicação reside nas condições de fronteira utilizadas. Recorrendo a uma abordagem de campo distante [Böhm 2012], os campos impostos na homogeneização inversa são também utilizados neste caso. No entanto,

são transformados em condições de fronteira adequadas para a resolução do problema de elementos finitos definido nas restrições do problema. Estas condições de fronteira têm forçosamente de manter a periodicidade do estado deformado da célula representativa unitária. Porém, ao contrário das condições homogêneas de dois graus de liberdade utilizadas na HEA, devem permitir a deformação global da CRU para além das oscilações típicas da abordagem multiescala. Neste caso, é possível impor condições de fronteira naturais e essenciais tanto ao nível mecânico quanto ao nível térmico. Associadas a estas condições de fronteira devem ser utilizadas condições de periodicidade que envolvam não só os nós associados mas também nós de controlo, responsáveis pela deformação global da CRU, isto é, nestes campos, ao contrário dos obtidos como solução para os problemas microestruturais da HEA, os resultados não correspondem a médias nulas. Esta metodologia será aprofundada aquando da introdução das questões numéricas associadas. Note-se ainda que, após convergência do processo de optimização, é realizada a homogeneização da distribuição de material obtida para se obter a correspondente informação constitutiva.

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.



# Parte III

## Implementação



## Capítulo 7

# Programa mainFRAN

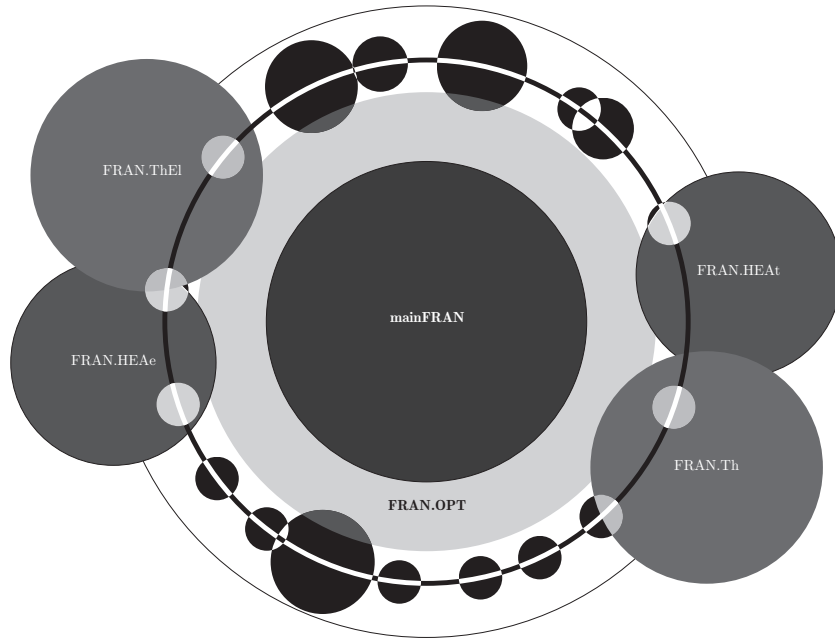
*Descrevem-se os principais aspectos numéricos e computacionais do programa desenvolvido no contexto deste trabalho. Abordam-se questões gerais, optimização topológica, cálculo multiescala e cálculo paralelo.*

---

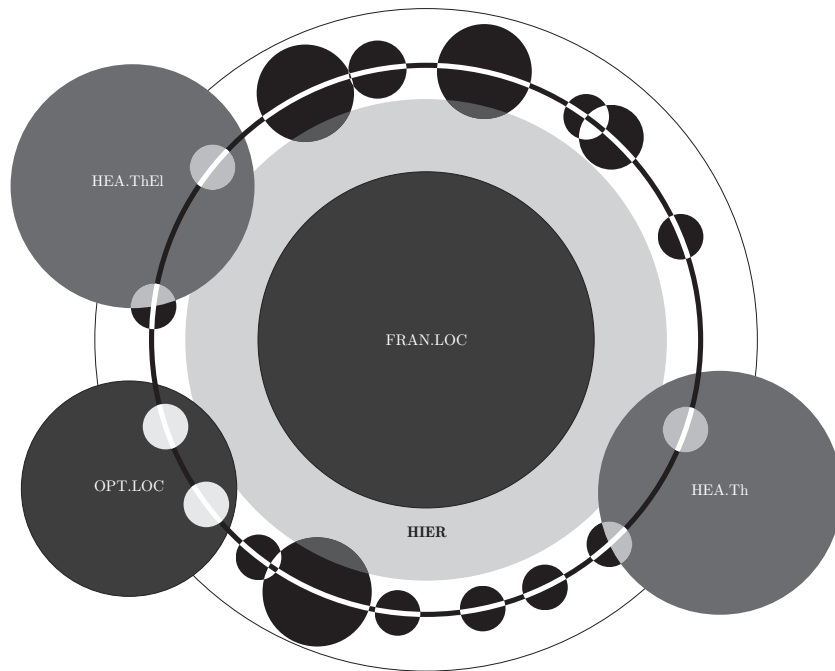
### 7.1 Introdução

Uma das bases deste trabalho é o desenvolvimento de uma ferramenta computacional para responder aos objectivos propostos. O programa mainFRAN é programa de simulação numérica que concentra diversos tipos de cálculo. Por um lado, utiliza o Método dos Elementos Finitos (MEF) para resolver problemas térmicos e termomecânicos, bi- e tridimensionais. Por outro lado, diferentes módulos de cálculo permitem a execução em cálculo paralelo, cálculo multiescala e diferentes aplicações de optimização topológica. Esta plataforma, desenvolvida em Fortran 90, foi construída de forma modular e dinâmica, tanto em termos de alocação de memória quanto em termos da sua estrutura. O programa foi desenvolvido de modo a permitir alguma flexibilidade nas suas alternativas de cálculo. Por um lado, a alocação de memória é dinâmica, permitindo que os procedimentos e as suas variáveis sejam correctamente executados e dimensionadas independentemente das dimensões ou do tipo de problema. Por outro lado, construiu-se um conjunto de livrarias comuns, partilhadas por módulos principais de cálculo, que possibilitam uma estrutura de programação mais limpa, assim como, caso necessário, uma mais fácil expansão de modos de cálculo. Esta opção, por vezes divergente da estrutura tipicamente sequencial da programação em Fortran, pode acarretar, contudo, alguns compromissos. Apesar das suas vantagens, a estrutura modular cria algumas complexidades de implementação, nomeadamente em termos de processamento paralelo. Podem ver-se nas figura 7.1 ilustrações da estrutura modular do programa mainFRAN. A figura 7.1(a) mostra os principais módulos de cálculo, assim como as camadas partilhadas. Por sua vez, a figura 7.1(b) ilustra a estrutura local, utilizada nos processos multiescala, ilustrando o facto de fazer uso da mesma estrutura, e partilhar módulos de cálculo e livrarias com a estrutura de controlo principal.

Neste capítulo, em detrimento de uma descrição geral do código implementado, focam-se apenas alguns detalhes específicos. Assim, as secções seguintes centram-se em aspectos característicos dos



(a)



(b)

Figura 7.1: Ilustração da estrutura modular do programa mainFRAN: (a) estrutura geral e (b) estrutura local.

tipos de cálculo em análise, nomeadamente ao nível de procedimentos multiescala ou de optimização. Algumas questões gerais, nomeadamente relacionadas com o método dos elementos finitos ou a resolução de sistemas de equações, são ainda abordadas pela sua influência em aspectos específicos de cálculo.

## 7.2 Método dos Elementos Finitos

Os processos de discretização espacial e a definição dos diferentes problemas neste trabalho seguem os procedimentos habituais do método dos elementos finitos. A formulação geral do MEF pode ser consultada em detalhe em diversas referências [Zienkiewicz e Taylor 1989, Oñate 1995, Bathe 1996, Teixeira-Dias *et al.* 2010]. É, no entanto, conveniente especificar alguns detalhes relevantes.

### 7.2.1 Elementos Finitos Isoparamétricos

Utilizam-se elementos finitos bidimensionais (triangulares e quadrangulares) e tridimensionais (tetraédricos e hexaédricos), lineares e quadráticos. Estes elementos são ilustrados nas figuras 7.2 e 7.3, para elementos bidimensionais e tridimensionais, respectivamente. Mostram-se aqui as suas representações no referencial global  $Oxyz$  e a sua representação isoparamétrica, no sistema de coordenadas naturais  $O\xi\eta\zeta$ , para a geometria normalizada do elemento. A formulação isoparamétrica dos elementos utilizados é definida com coordenadas naturais que variam no intervalo  $[0, 1]$  para elementos triangulares e tetraédricos, e no intervalo  $[-1, 1]$  para elementos quadrangulares e hexaédricos. Os elementos implementados resumem-se na tabela 7.1.

Tabela 7.1: Lista de elementos finitos implementados no programa mainFRAN.

REF. <sup>a</sup>	Tipo	Dim.	N.º Nós	Interpolação	Integração	Obs.
TR3	Triangular	2-D	3	Linear	1	–
QD4	Quadrilátero	2-D	4	Linear	$2 \times 2$	Lagrangiano/Serendipítico
QD8	Quadrilátero	2-D	8	Quadrática	$3 \times 3$	Serendipítico
QD9	Quadrilátero	2-D	9	Quadrática	$3 \times 3$	Lagrangiano
TT4	Tetraédrico	3-D	4	Linear	1	–
T10	Tetraédrico	3-D	10	Quadrática	4	–
HX8	Hexaédrico	3-D	8	Linear	$2 \times 2 \times 2$	Lagrangiano/Serendipítico
H20	Hexaédrico	3-D	20	Quadrática	$3 \times 3 \times 3$	Serendipítico

### 7.2.2 Condições de Fronteira

As condições de fronteira podem ser divididas em condições naturais ou de Neumann e condições essenciais ou de Dirichlet<sup>1</sup> [Fung e Tong 2001]. As últimas actuam directamente sobre os graus de liberdade. Nesta secção, focam-se variantes de condições essenciais e alguns casos específicos de condições de fronteira naturais. Usa-se como referência o problema mecânico, actuando sobre deslocamentos e carregamentos. No entanto, as relações aqui discutidas são directamente aplicáveis a outros problemas e graus de liberdade, nomeadamente ao problema térmico.

As condições de Dirichlet, em problemas de elasticidade, são tradicionalmente utilizadas para a modelação de apoios ou deslocamentos prescritos. Estas, por prescreverem directamente valores sobre graus de liberdade, são chamadas de condições SFC (*Single-Freedom Constraints*) [Felippa 2004] e podem ser expressas como  $u_i = c$ .  $c$  é um valor finito, tornando a condição homogénea se  $c = 0$  ou não-homogénea se  $c \neq 0$ . No entanto, as condições de fronteira essenciais podem ser mais complexas, envolvendo múltiplos graus de liberdade. Neste caso, podem chamar-se condições MFC (*Multi-Freedom Constraints*) [Felippa 2004, Li 2008]. Usam-se aqui equações para definir condições

<sup>1</sup>Existe ainda um terceiro tipo de condições de fronteira, as condições de Robin. Não utilizadas neste trabalho, estas correspondem a uma combinação linear das condições de Neumann e de Dirichlet.

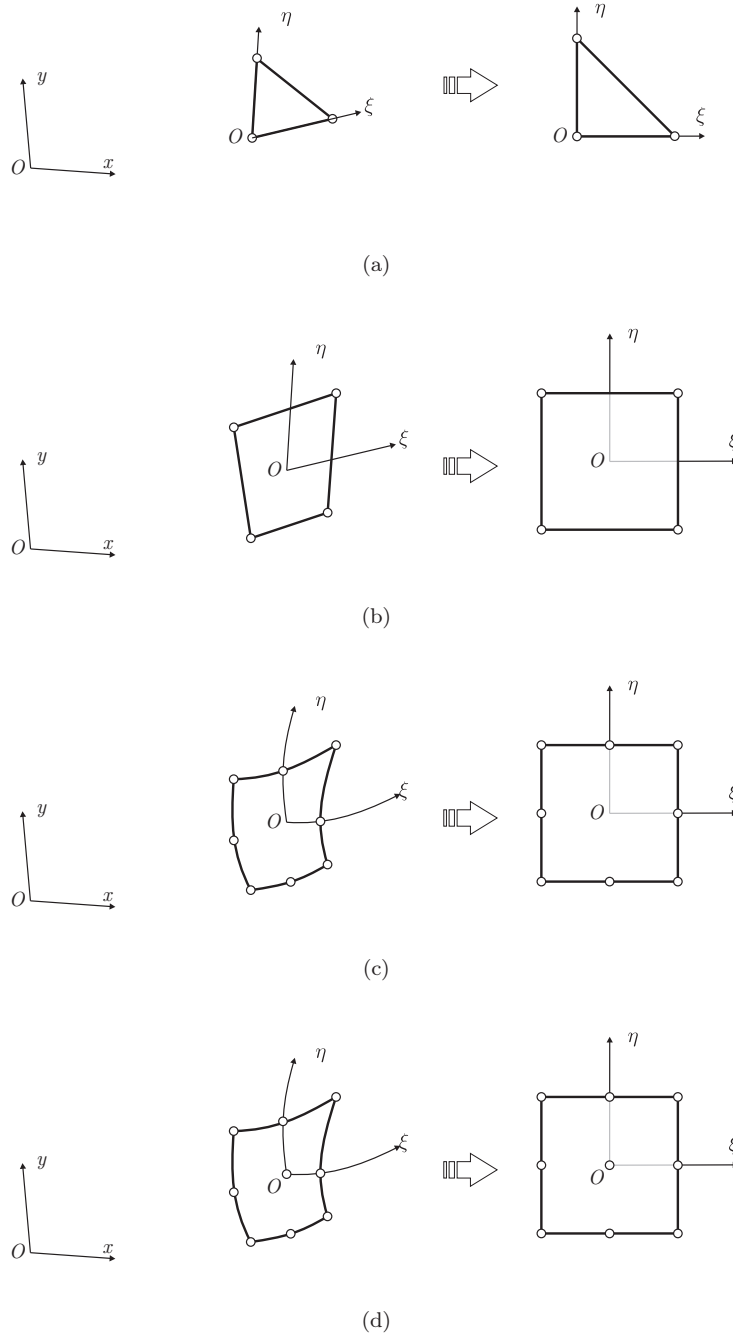


Figura 7.2: Referenciais global ( $Oxyz$ ) e natural ( $O\xi\eta\zeta$ ) dos elementos isoparamétricos bidimensionais utilizados: (a) elemento triangular de 3 nós, (b) elemento quadrangular de 4 nós, (c) elemento quadrangular de 8 nós e (d) elemento quadrangular de 9 nós.

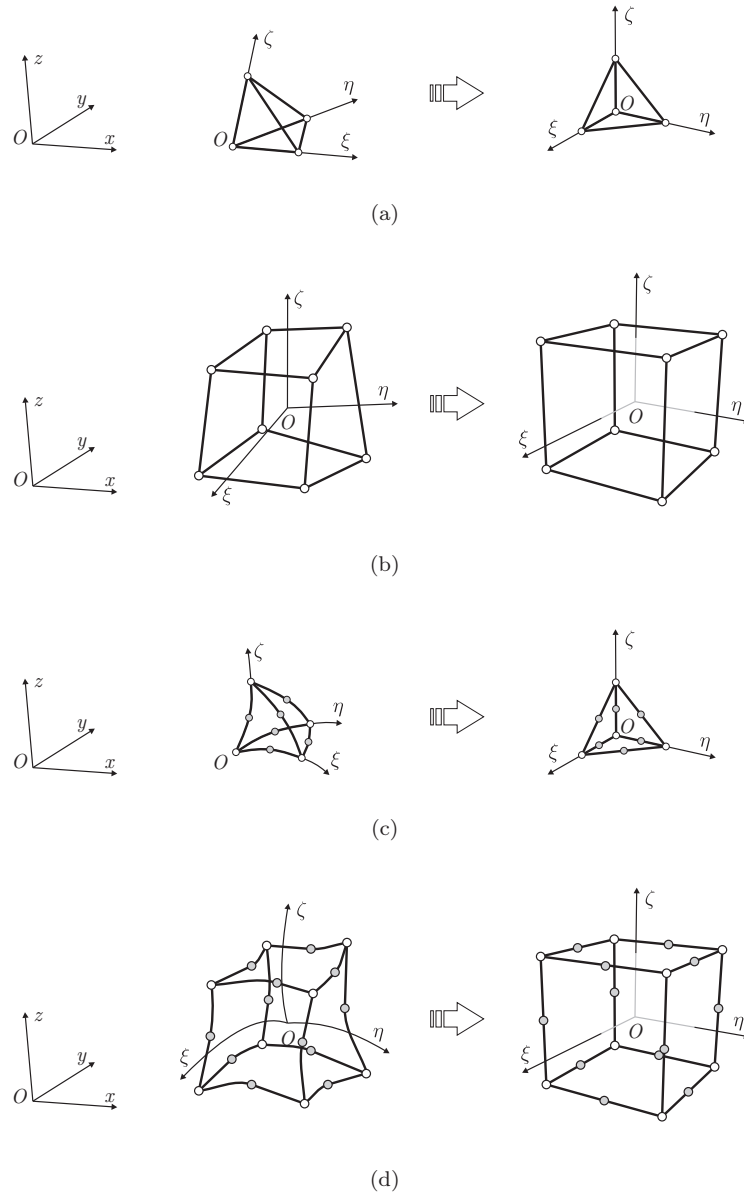


Figura 7.3: Referenciais global ( $Oxyz$ ) e natural ( $O\xi\eta\zeta$ ) dos elementos isoparamétricos tridimensionais utilizados: (a) elemento tetraédrico de 4 nós, (b) elemento hexaédrico de 8 nós, (c) elemento tetraédrico de 10 nós e (d) elemento hexaédrico de 20 nós.

MFC de igualdade, apesar de o caso mais geral corresponder a inequações para a imposição de condições MFC, como

$$f(\text{graus de liberdade}) = \text{valor prescrito} . \quad (7.1)$$

Esta corresponde à forma canónica das condições MFC, onde todos os graus de liberdade se encontram no primeiro termo. A MFC é chamada de multiponto ou multinó se envolve diferentes nós da malha de elementos finitos. Podem ainda ser lineares ou não-lineares, de acordo com a dependência funcional entre graus de liberdade. Tal como as SFC, podem também ser homogêneas ou heterogêneas, de acordo com o valor de  $c$ . Em aplicações estruturais, as MFC surgem tipicamente como condições do tipo

$$u_i + u_j = 0 \quad \text{ou} \quad u_i + u_j = c . \quad (7.2)$$

Neste trabalho, as MFC surgem sempre como condições de periodicidade. Uma Célula Representativa Unitária (CRU) deve ter periodicidade geométrica (e material) tanto na sua geometria original quanto deformada. A periodicidade deformada é controlada com MFC homogêneas se a solicitação envolver imposição de carregamentos/tensões e não-homogêneas se depender da imposição de um dado estado de deformação [Oliveira *et al.* 2010b].

A aplicação à homogeneização por expansão assintótica corresponde ao caso mais simples de condições homogêneas de dois graus de liberdade. As condições de periodicidade são impostas na superfícies externas da CRU (*vd.* Fig. 7.4). Para uma CRU hexaédrica em  $y_1 \in [0, y_1^0]$ ,  $y_2 \in [0, y_2^0]$  e  $y_3 \in [0, y_3^0]$  (*vd.* Fig. 7.4b), as condições de fronteira podem ser definidas, para o caso geral 3-D, como

$$\begin{aligned} \chi(0, y_2, y_3) - \chi(y_1^0, y_2, y_3) &= \mathbf{0} , \\ \chi(y_1, 0, y_3) - \chi(y_1, y_2^0, y_3) &= \mathbf{0} \quad \text{e} \\ \chi(y_1, y_2, 0) - \chi(y_1, y_2, y_3^0) &= \mathbf{0} , \end{aligned} \quad (7.3)$$

onde  $\chi$  é a solução da equação 6.38 (*vd.* Cap. 6.2). Para evitar movimento de corpo rígido, é necessário restringir deslocamentos e rotações num ponto arbitrário da malha, ou, visto as condições serem homogêneas, restringir os deslocamentos nos vértices da CRU.

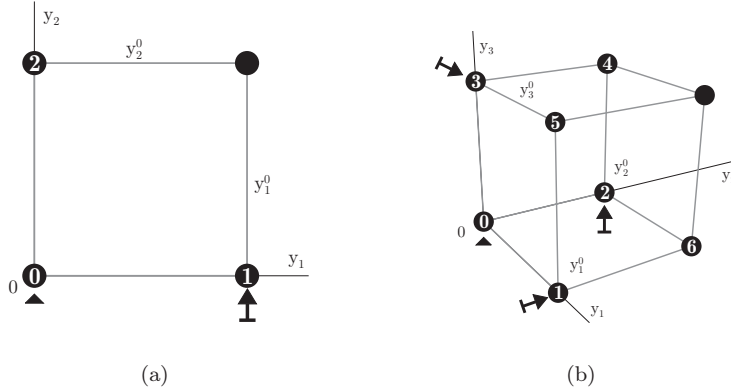


Figura 7.4: Células representativas unitárias periódicas: (a) quadrilátera (2-D) e (b) hexaédrica (3-D).

Um caso mais geral de condições homogêneas é utilizado na abordagem local de otimização multiescala, em problemas com imposição de campos de tensão (*vd.* Sec. 6.6). A imposição de



um campo macroestrutural de tensão  $\sigma$  na CRU (*e.g.* originário de um ponto de integração da malha da estrutura global) pode ser feita calculando o carregamento equivalente ( $\mathbf{P}$ ) na CRU. Este é aplicado na fronteiras da célula unitária ( $\Gamma$ ), onde [Böhm 2012]

$$\mathbf{P} = \int_{\Gamma} \mathbf{t}_a(\mathbf{y}) d\Gamma, \quad \text{com} \quad \mathbf{t}_a = \sigma_a \cdot \mathbf{n}_{\Gamma}. \quad (7.4)$$

$\mathbf{t}_a$  é o vector de tracção superficial, correspondente ao campo de tensões (*far-field stress*) aplicado num dado ponto da superfície exterior da CRU e  $\mathbf{n}_{\Gamma}$  o versor normal local exterior a  $\Gamma$ . Numericamente, a imposição de carregamentos equivalentes envolve a multiplicação de uma dada componente de tensão pela área superficial da fronteira num dado elemento e a sua distribuição pelos nós com conectividade nessa fronteira. Este campo equivalente deve ser antiperiódico para se garantir o equilíbrio, à semelhança dos carregamentos característicos que controlam o problema de homogeneização. Adicionalmente, para se garantir a periodicidade, é necessária a existência de condições MFC adequadas. Estas continuam a ser homogêneas, mas onde as anteriores apenas permitiam oscilações em torno de um estado médio, neste caso devem permitir a deformação global da CRU. Assim, os vértices deixam de estar fixos e as MFC associam mais de dois nós. O movimento de corpo rígido é impedido recorrendo a condições SFC, ilustradas nas figuras 7.4, restringindo 6 graus de liberdade para o problema 3-D e 3 para o 2-D. As MFC, por sua vez, usam os vértices de controlo para condicionar os restantes nós da fronteira e garantir o comportamento periódico da CRU. As condições resultantes podem escrever-se como

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(y_1^0, y_2) &= \mathbf{u}(0, y_2) + \mathbf{u}_1 \quad \text{e} \\ \mathbf{u}(y_1, y_2^0) &= \mathbf{u}(y_1, 0) + \mathbf{u}_2, \end{aligned} \quad (7.5)$$

para o caso 2-D, e

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(y_1^0, y_2, y_3) &= \mathbf{u}(0, y_2, y_3) + \mathbf{u}_1, \\ \mathbf{u}(y_1, y_2^0, y_3) &= \mathbf{u}(y_1, 0, y_3) + \mathbf{u}_2 \quad \text{e} \\ \mathbf{u}(y_1, y_2, y_3^0) &= \mathbf{u}(y_1, y_2, 0) + \mathbf{u}_3, \end{aligned} \quad (7.6)$$

para o caso 3-D.

Alternativamente, é possível recorrer às deformações  $\varepsilon$  macroestruturais num dado ponto da estrutura global homogeneizada para solicitar a CRU. A principal diferença, neste caso, é a utilização exclusiva de condições de Dirichlet. A localização é feita forçando deslocamentos equivalentes que correspondam a uma deformação média idêntica ao estado imposto. Isto é feito utilizando as condições não-homogêneas

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(y_1^0, y_2) - \mathbf{u}(0, y_2) &= \mathbf{c}_1 \quad \text{e} \\ \mathbf{u}(y_1, y_2^0) - \mathbf{u}(y_1, 0) &= \mathbf{c}_2, \end{aligned} \quad (7.7)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(y_1^0, y_2, y_3) - \mathbf{u}(0, y_2, y_3) &= \mathbf{c}_1, \\ \mathbf{u}(y_1, y_2^0, y_3) - \mathbf{u}(y_1, 0, y_3) &= \mathbf{c}_2 \quad \text{e} \\ \mathbf{u}(y_1, y_2, y_3^0) - \mathbf{u}(y_1, y_2, 0) &= \mathbf{c}_3, \end{aligned} \quad (7.8)$$

para os casos 2-D e 3-D, respectivamente. Uma configuração alternativa pode ser obtida com as mesmas condições homogêneas utilizadas no caso de imposição de tensão. Estas garantem periodicidade, ao mesmo tempo que se utilizam deslocamentos prescritos sobre os nós de controlo como

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_0 &= \mathbf{c}_1, \\ \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_0 &= \mathbf{c}_2 \quad \text{e} \\ \mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_0 &= \mathbf{c}_3. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Note-se que a terceira condição é utilizada apenas no caso tridimensional. Adicionalmente,  $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ , pelo que as equações 7.9 se reduzem a condições de deslocamento prescrito. Sendo  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$  as dimensões da CRU em cada uma das direcções ortogonais, os coeficientes independentes das condições podem definir-se como

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1/L_1 &= \left\{ \varepsilon_{11} \quad \frac{1}{2}\gamma_{12} \right\}^T \text{ e} \\ \mathbf{c}_2/L_2 &= \left\{ \frac{1}{2}\gamma_{12} \quad \varepsilon_{22} \right\}^T, \end{aligned} \quad (7.10)$$

para o problema 2-D, e

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1/L_1 &= \left\{ \varepsilon_{11} \quad \frac{1}{2}\gamma_{12} \quad \frac{1}{2}\gamma_{13} \right\}^T, \\ \mathbf{c}_2/L_2 &= \left\{ \frac{1}{2}\gamma_{12} \quad \varepsilon_{22} \quad \frac{1}{2}\gamma_{23} \right\}^T \text{ e} \\ \mathbf{c}_3/L_3 &= \left\{ \frac{1}{2}\gamma_{13} \quad \frac{1}{2}\gamma_{23} \quad \varepsilon_{33} \right\}^T, \end{aligned} \quad (7.11)$$

para o problema 3-D.

A implementação numérica das condições de fronteira MFC apresentadas é feita sobre a matriz de rigidez global do sistema de equações em análise. É este sistema modificado que efectivamente é resolvido. Existem três métodos principais para impor estas condições: (i) o método de eliminação, (ii) o método de penalidade e (iii) o método dos multiplicadores de Lagrange [Felippa 2004]. Note-se que qualquer um destes métodos pode também ser utilizado para prescrever valores isolados a graus de liberdade, isto é, impor condições SFC. Além disso, numa primeira abordagem, não necessitam forçosamente de alterações no procedimento de montagem, permitindo que o sistema seja montado e apenas depois sejam acrescentadas as condições de fronteira. Neste trabalho, utiliza-se essencialmente o método de penalidade, apesar de ter sido também implementado o método dos multiplicadores de Lagrange para efeitos de comparação e uma versão simplificada do método de eliminação para condições de fronteira homogêneas de valor prescrito.

### 7.2.2.1 Método de Eliminação

Este método requer a distinção entre graus de liberdade mestre e escravo. Isto pode ser feito caso a caso ou de forma automatizada de acordo com a análise das fronteiras da malha de elementos finitos da célula representativa unitária. Os graus de liberdade escravos são removidos do sistema, e a sua rigidez e carregamentos são adicionados aos graus de liberdade mestres correspondentes. A adição de uma condição de fronteira homogênea de periodicidade  $u_i - u_j = 0$  ao sistema de equações lineares  $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$  pode ser feita removendo as linhas e colunas escravas, e definindo as equações restantes como

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & & \\ \dots & K_{ii} + K_{jj} & \dots & \\ & \vdots & \ddots & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i + f_j \\ \vdots \end{Bmatrix}, \quad (7.12)$$

onde  $i$  é o grau de liberdade mestre e  $j$  o escravo. Se a condição for não-homogênea ( $u_i - u_j = c \neq 0$ ), o coeficiente independente é multiplicado pela rigidez do grau de liberdade escravo e subtraído ao carregamento do mestre correspondente. Se o escravo está ainda associado a outros graus de liberdade, a sua rigidez deve ser também contabilizada. Considerando que o escravo  $j$  tem conectividade com  $k$ , a condição MFC não-homogênea resulta em

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \\ \dots & K_{ii} + K_{jj} & \dots & K_{jk} & \dots \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \dots & K_{jk} & \dots & K_{kk} & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_k \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i + f_j - c \times K_{jj} \\ \vdots \\ f_k - c \times K_{jk} \\ \vdots \end{Bmatrix}. \quad (7.13)$$

Depois de resolver as equações 7.12 ou 7.13,  $u_j$  é calculado utilizando a equação da condição imposta. Note-se que, apesar de ser matematicamente equivalente escolher qualquer um dos graus de liberdade envolvidos como mestres, a eficiência resultante na resolução de sistemas de equações esparsos pode não ser a mesma, assim como o seu condicionamento. Este método pode também originar algumas complexidades numéricas quando as condições envolvem mais graus de liberdade e/ou quando nós mestres são simultaneamente escravos em outras condições. Uma das principais limitações deste método é o facto de envolver o redimensionamento do sistema de equações e necessitar de um sistema auxiliar para se obter a solução para as incógnitas escravas. Este método é muito útil para condições lineares simples, mas é limitado como método de aplicação geral pela crescente dificuldade de actuação com o número e complexidade das condições, assim como por falta de robustez [Felippa 2004].

### 7.2.2.2 Método de Penalidade

O método de penalidade é talvez o método mais comum para a imposição de condições MFC e de condições de fronteira de valor prescrito, sendo a sua implementação menos intrusiva que as alternativas. Não necessita de qualquer alteração ao esquema de armazenamento ou ao sistema de equações, para além da adição de alguns termos. Considerando novamente uma condição homogénea de periodicidade ( $u_i - u_j = 0$ ), é possível fazer uma analogia física com esta imposição (vd. Fig. 7.5(a)). Adicionar esta condição, utilizando o método da penalidade, é equivalente a assemblar uma barra rígida no sistema, com conectividade entre os dois graus de liberdade associados. Por esta razão, este tipo de condição é muitas vezes classificado como uma ligação rígida. Numericamente, a rigidez infinita é substituída por uma penalidade finita  $w_p$ . As equações locais para este elemento barra são

$$w_p \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (7.14)$$

Assemblar estas equações no sistema global ( $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ ) resulta em

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & & \vdots \\ \dots & w_p + K_{ii} & \dots & -w_p + K_{ij} & \dots \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dots & -w_p + K_{ji} & \dots & w_p + K_{jj} & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \end{Bmatrix}. \quad (7.15)$$

Para condições não-homogéneas (MFC ou SFC), a principal diferença prende-se com o coeficiente independente. Neste caso, a condição  $u_i - u_j = c$  requer a assemblagem da equação

$$w_p \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = w_p \begin{Bmatrix} c \\ -c \end{Bmatrix}. \quad (7.16)$$

no sistema de equilíbrio global. Note-se que em ambos os casos o peso das condições no sistema global é suficientemente elevado para as tornar dominantes e resultar na imposição pretendida. Uma forma genérica de aplicação de condições lineares com este método pode escrever-se como

$$w_p \mathbf{c}^T \mathbf{c} \mathbf{u} = w_p \theta \mathbf{c}^T, \quad (7.17)$$

para uma condição  $\alpha u_i + \beta u_j + \kappa u_k = \theta$  com  $\mathbf{c} = \{ \alpha \ \beta \ \kappa \}$  e  $\mathbf{u} = \{ u_i \ u_j \ u_k \}^T$ .

O custo desta flexibilidade de implementação reside na escolha do valor de penalidade  $w_p$ . Idealmente deveria ser  $w_p = +\infty$ , sendo que a utilização de um valor finito origina um erro  $e_g = u_i - u_j - c \neq 0$ . A magnitude de  $|e_g|$  é inversamente proporcional à magnitude de  $w_p$ . Existem, no entanto, limitações de *hardware* e *software* para a escolha da penalidade. Por um lado, o valor de  $w_p$  é limitado pelo valor de *overflow*<sup>2</sup> do computador utilizado. Por outro lado, surgem questões

<sup>2</sup>*Overflow* refere-se a situações em que cálculos computacionais produzem blocos de dados ou valores numéricos demasiado elevados para serem alocados na unidade de memória.

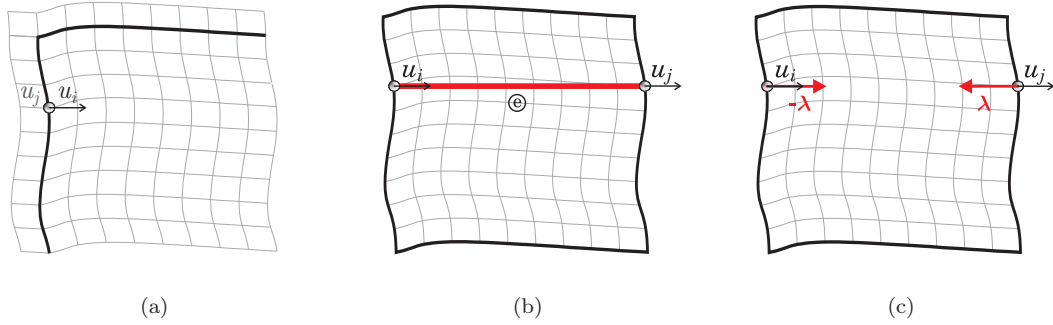


Figura 7.5: Aplicação de condições de fronteira *Multi-Freedom Constraints* (MFC) com o método (a) de eliminação, (b) de penalidade e (c) dos multiplicadores de Lagrange.

numéricas relacionadas com a inversão da matriz de rigidez, para valores de  $w_p$  muito inferiores aos de *overflow*. De facto, como se verá mais à frente, o aumento do peso de penalidade piora o condicionamento da matriz de rigidez. No limite, as linhas e colunas que contêm a condição tornam-se linearmente dependentes, levando a que a matriz de rigidez se torne singular. Ainda assim, o valor de  $w_p$  deve ser várias ordens de grandeza superior à norma máxima da matriz<sup>3</sup>. Neste sentido, é comum seguir um método heurístico designado por regra da raiz, usando  $w_p = 10^{k+p/2}$  para uma matriz cujo maior coeficiente seja  $10^k$ , com uma precisão  $p$  dígitos [Felippa 2004].

### 7.2.2.3 Método dos Multiplicadores de Lagrange

À semelhança do método de penalidade, é possível fazer um paralelo físico com a aplicação do método dos multiplicadores de Lagrange. Neste caso, o método corresponde a adicionar as cargas necessárias para estabelecer o equilíbrio pretendido com as condições de fronteira (*vd.* Fig. 7.5(b)). Estas cargas têm uma intensidade  $\lambda$ , correspondente ao multiplicador de Lagrange associado à condição a impor. O caso genérico de imposição de uma condição MFC não-homogénea  $u_i - u_j = c$ , com  $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ , escreve-se como

$$\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & & & 0 \\ & \ddots & & & & \vdots \\ & & \ddots & & & 0 \\ \dots & K_{ii} & \dots & K_{ij} & \dots & 1 \\ & & & & & 0 \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \dots & K_{ji} & \dots & K_{jj} & \dots & -1 \\ & & & & & 0 \\ & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 \dots 0 & 1 & 0 \dots 0 & -1 & 0 \dots 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \\ c \end{Bmatrix}. \quad (7.18)$$

<sup>3</sup>A norma máxima da matriz  $\mathbf{A}$  é  $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max |a_{ij}|$ .

Pode ainda ser apresentado na forma geral

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{c} \end{Bmatrix}. \quad (7.19)$$

Para um dado conjunto de condições lineares  $\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{c}$ , onde  $\boldsymbol{\lambda}$  é o vector dos multiplicadores de Lagrange  $\lambda_i$ . Para além dos valores dos graus de liberdade, este sistema fornece ainda os valores de  $\lambda_i$  no equilíbrio. Estes podem ser utilizados para o cálculo de resultantes nos graus de liberdade afectados pelas condições com  $-\mathbf{A}^T\boldsymbol{\lambda}$ .

A maior vantagem deste método relativamente aos métodos de penalidade é o facto de ser um método exacto. Adicionalmente, facilita o cálculo das reacções nos graus de liberdade com condições de fronteira e não necessita do controlo de parâmetros de penalidade. Por outro lado, introduz incógnitas adicionais e obriga à utilização de algoritmos de armazenamento mais complexos para responder à necessidade de redimensionamento do sistema. Além disso, é fortemente sensível à dependência linear das equações que definem as condições e não se adapta a algoritmos de resolução baseados em matrizes definidas positivas. Este facto é crítico na utilização de métodos de resolução como método do gradiente conjugado. Note-se ainda que os métodos de multiplicadores de Lagrange têm inúmeras aplicações, nomeadamente em problemas de optimização.

### 7.2.3 Armazenamento Matricial

Os problemas considerados neste trabalho resultam em sistemas de equações cujas matrizes de coeficientes são esparsas. Os coeficientes não-nulos constituem uma percentagem reduzida do número total de coeficientes, pelo que a utilização da totalidade da matriz reduz a eficiência das operações matriciais. Esta redução na eficiência torna-se ainda mais evidente com o aumento da dimensão do problema, implicando um cada vez maior esforço computacional desperdiçado em multiplicações com coeficientes nulos. Esta limitação pode ser ultrapassada identificando os coeficientes nulos e eliminando as correspondentes operações de multiplicação. Neste trabalho recorre-se para o efeito ao esquema CRS (*Compressed Row Storage*) como algoritmo de armazenamento matricial. As vantagens deste formato são significativas [Barrett *et al.* 1994], permitindo o armazenamento de  $2n_{\bar{n}} + n + 1$  coeficientes, em oposição aos  $n^2$  coeficientes do esquema de armazenamento total.  $n \times n$  é a dimensão da matriz e  $n_{\bar{n}}$  o número de coeficientes não-nulos. Como ilustração do esquema de armazenamento CRS considere-se como exemplo a seguinte matriz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & b \\ c & d & 0 & 0 \\ 0 & e & f & g \\ h & 0 & i & j \end{bmatrix}.$$

O armazenamento CRS de  $\mathbf{A}$  é definido nos vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \{ a \ b \ c \ d \ e \ f \ g \ h \ i \ j \}, \\ \mathbf{i} &= \{ 1 \ 4 \ 1 \ 2 \ 2 \ 3 \ 4 \ 1 \ 3 \ 4 \} \text{ e} \\ \mathbf{j} &= \{ 1 \ 3 \ 5 \ 8 \ 11 \}. \end{aligned}$$

A matriz  $\mathbf{A}$  é armazenada num vector que contém unicamente os valores não-nulos ( $\mathbf{m}$ ). Os vectores  $\mathbf{i}$  e  $\mathbf{j}$ , por sua vez, correspondem ao número da coluna de cada coeficiente não-nulo na matriz  $\mathbf{A}$  e ao índice do primeiro valor de cada linha em  $\mathbf{m}$ , respectivamente. A última componente do vector  $\mathbf{j}$  especifica a dimensão  $n_{\bar{n}}$  do vector  $\mathbf{m}$ , tendo o valor  $n_{\bar{n}} + 1$ .

Note-se que no esquema CRS é a própria conectividade que determina os índices dos vectores de ponteiros. Desta forma evitam-se os cuidados específicos com a ordenação dos graus de liberdade do sistema. Em rigor, a assemblagem é feita de forma natural. Os índices globais são ditados pela relação entre a conectividade de cada elemento e a numeração dos graus de liberdade. O esquema

pode ser também adaptado para armazenar apenas uma matriz triangular no caso de matrizes simétricas, reduzindo a memória necessária. Contudo, esta alteração aumenta a complexidade dos algoritmos usados para acesso aos dados, assim como para a realização de operações matriciais [Barrett *et al.* 1994]. No tipo de problemas resolvidos neste trabalho, a redução de memória não justifica a complexidade acrescida dos algoritmos associados, pelo que se opta por sacrificar um pouco a memória em prol da velocidade de processamento. Informação adicional sobre este tipo de metodologia pode ser consultada em [Saad 2003, Stathis 2004].

### 7.2.4 Resolução do Sistema de Equações

Um problema resolvido através do método dos elementos finitos define-se tipicamente num sistema de equações lineares do tipo

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (7.20)$$

onde a matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  é não-singular e geralmente esparsa.  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$  são os vectores de incógnitas e de termos independentes, respectivamente. A maior fracção do tempo de cálculo corresponde à sua resolução [van der Vorst 2003], pelo que a selecção de um método numérico de resolução eficiente é essencial em termos de desempenho. Os métodos de resolução podem dividir-se em (i) métodos directos e (ii) métodos iterativos [Meurant 1999].

Os métodos directos baseiam-se na factorização da matriz  $\mathbf{A}$ . O método de eliminação de Gauss, ou de factorização  $\mathbf{LU}$ , é um exemplo corrente de método directo. A robustez e a precisão na resolução de sistemas de equações lineares levam a que este tipo de método seja bastante utilizado. No entanto, a aplicação destes métodos a matrizes esparsas tem a desvantagem de requerer elevadas quantidades de memória computacional. Isto resulta da alteração do padrão de esparsidade da matriz de coeficientes do sistema. De facto, na aplicação do método de eliminação de Gauss verifica-se que posições originalmente nulas da matriz  $\mathbf{A}$  passam a ser ocupadas por valores não-nulos. Este fenómeno, habitualmente designado por *fill-in*, resulta na transformação de uma matriz originalmente esparsa numa matriz densa. Os métodos directos apresentam ainda um baixo grau de paralelismo, o que limita a expansibilidade para sistemas de computação paralela. Além disso, a propagação de erros numéricos nas operações aritméticas pode originar problemas de precisão numérica. Mais detalhes sobre métodos directos para a resolução de sistemas com matrizes esparsas podem ser consultados em [Duff *et al.* 1989].

Nos métodos iterativos define-se uma aproximação inicial  $\mathbf{x}^{(0)}$  para a solução  $\mathbf{x}^*$ . Com base num processo iterativo, gera-se uma sucessão de vectores-solução  $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}\}$  até que a solução numérica seja suficientemente próxima da solução exacta. De uma forma geral, um método iterativo diz-se convergente se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*. \quad (7.21)$$

Neste contexto, um processo iterativo corresponde a uma técnica em que, dada uma aproximação inicial da solução, se procura minimizar o erro  $\mathbf{e} = \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)}$  ou o resíduo  $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(k)}$ . De um modo geral, as principais vantagens dos métodos iterativos relativamente aos métodos directos são [Axelsson 1996, Saad 2003]:

1. O desempenho computacional do processo pode ser melhorado se a aproximação inicial  $\mathbf{x}^{(0)}$  for próxima de  $\mathbf{x}^*$ ;
2. Não alteram o padrão da esparsidade da matriz de coeficientes do sistema, exigindo menores quantidades de memória computacional;
3. Não exigem a definição explícita da matriz de coeficientes do sistema, pelo que se revelam adequados para paralelização.

Refira-se, no entanto, que geralmente não é possível prever o número de iterações necessárias para atingir uma determinada precisão. Assim, embora ambos os tipos de método apresentem vantagens e desvantagens, é usualmente a natureza do problema que determina qual o método de resolução mais adequado.

Os métodos iterativos são geralmente classificados como (i) métodos estacionários e (ii) métodos não-estacionários. Os métodos não-estacionários distinguem-se dos estacionários no sentido em que os dados são alterados no decorrer de cada iteração. Embora apresentem um nível de complexidade superior, os métodos não-estacionários são frequentemente mais eficientes [Saad 2003]. Actualmente, os métodos iterativos não-estacionários mais populares pertencem ao conjunto de métodos baseados em subespaços de Krylov [van der Vorst 2003]. A sua utilização é determinada pelas características da matriz de coeficientes  $\mathbf{A}$ . Consequentemente, uma vez que o tipo de problemas resolvidos neste trabalho envolve sistemas com matrizes simétricas e definidas positivas, o Método do Gradiente Conjugado (*Conjugate Gradient* – CG) [Hestenes e Stiefel 1952] é o mais indicado.

### 7.2.4.1 Método do Gradiente Conjugado

O método do gradiente conjugado é considerado uma das técnicas mais eficientes para a resolução de sistemas de equações lineares com matrizes de coeficientes simétricas e definidas positivas [Golub e O’Leary 1989]. Inicialmente considerado um método directo por permitir obter a solução de um sistema de  $n$  equações lineares num máximo de  $n$  iterações, rapidamente se constatou que os erros provenientes do arredondamento numérico destruíam a propriedade de convergência finita deste método, não constituindo uma alternativa eficiente para a factorização de sistemas de equações lineares densos. No entanto, o método do CG é hoje considerado um método iterativo [Reid 1971]. Apesar de ser muitas vezes incapaz de superar a velocidade de cálculo de alguns métodos directos [Irons e Ahmad 1980], o método do CG é uma alternativa competitiva [Farhat e Wilson 1987]. Uma das razões para tal é a utilização de preconditionadores. Verifica-se que a velocidade de convergência do método do CG depende do condicionamento do sistema de equações lineares [Barrett *et al.* 1994]. Assim, a aplicação de preconditionamento ao sistema permite atingir velocidades de cálculo superiores às dos métodos directos [Saint-Georges *et al.* 1996].

Uma das vantagens da utilização do método do CG é o facto de não obrigar ao armazenamento dos coeficientes nulos da matriz  $\mathbf{A}$ . Além disso, a simetria desta matriz possibilita ainda o não-armazenamento de uma das suas partes triangulares. Por outro lado, a natureza intrinsecamente paralelizável do método do CG constitui também uma vantagem relevante deste método em relação aos métodos directos.

O método do gradiente conjugado é um método iterativo não-estacionário baseado em subespaços de Krylov [van der Vorst 2003]. Com este método, a resolução do sistema de equações 7.20 baseia-se na técnica de projecção ortogonal num subespaço afim

$$\mathbf{x}^{(0)} + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)}) , \quad (7.22)$$

em que  $\mathbf{x}^{(0)}$  é uma solução aproximada inicial,  $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}^{(0)})$  é o subespaço de Krylov gerado por  $\{\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^2\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{A}^3\mathbf{r}^{(0)}, \dots, \mathbf{A}^{m-1}\mathbf{r}^{(0)}\}$  e  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$  é o resíduo inicial [van der Vorst 2003]. Para uma matriz  $\mathbf{A}$  simétrica e definida positiva, esta técnica corresponde à minimização da função quadrática [Axelsson 1996]

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^T \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) . \quad (7.23)$$

O método do gradiente conjugado procura minimizar a função  $\varphi(\mathbf{x})$  em cada iteração

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_{k+1} \mathbf{p}^{(k+1)} , \quad (7.24)$$

em que  $\mathbf{x}^{(k)}$  é a solução aproximada actual e  $\alpha_{k+1}$  um escalar que actua segundo a direcção de



busca  $\mathbf{p}^{(k+1)}$  [Reid 1971]. O escalar  $\alpha_{k+1}$  é definido por

$$\alpha_{k+1} = \frac{[\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)}}{[\mathbf{p}^{(k+1)}]^T \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}}. \quad (7.25)$$

O resíduo actual é  $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k)}$ , enquanto que o novo resíduo é

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k+1)}. \quad (7.26)$$

Estes resíduos correspondem aos gradientes da função quadrática  $\varphi(\mathbf{x})$ . Sendo as direcções de busca conjugadas<sup>4</sup> relativamente a  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{p}^{(k+1)}$  é definida recursivamente por

$$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_k \mathbf{p}^{(k)}, \quad (7.27)$$

em que  $\beta_k$  é um escalar definido por

$$\beta_k = \frac{[\mathbf{r}^{(k)}]^T \mathbf{r}^{(k)}}{[\mathbf{r}^{(k-1)}]^T \mathbf{r}^{(k-1)}}. \quad (7.28)$$

Embora seja difícil prever a taxa de convergência do método do CG, é possível determinar um limite superior para a norma do erro associada a cada iteração. Este limite relaciona-se com o número de condição espectral<sup>5</sup> de  $\mathbf{A}$ , designado por  $\kappa(\mathbf{A})$ . Considerando a norma- $\mathbf{A}$  do vector<sup>6</sup>  $\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$ , a taxa de convergência pode ser determinada com a expressão [Ortega 1988]

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}} \leq 2 \left[ \frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right]^k \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{A}}. \quad (7.29)$$

De acordo com a expressão anterior, verifica-se que a norma- $\mathbf{A}$  do erro  $\mathbf{e}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*$  tende para zero quando  $k \rightarrow +\infty$ . Este facto justifica a natureza iterativa do método do gradiente conjugado [Meurant 1999]. Adicionalmente, constata-se que quanto mais próximo for  $\kappa(\mathbf{A})$  de 1, maior é a taxa de convergência do processo. O preconditionamento consiste na obtenção de um sistema equivalente a 7.20 em que a nova matriz de coeficientes possua um número de condição espectral mais próximo da unidade. Conseguem-se assim taxas de convergência mais elevadas [Benzi 2002].

#### 7.2.4.2 Técnicas de Precondicionamento

O preconditionamento do sistema 7.20 consiste na sua transformação linear de modo a minimizar o número de condição espectral. A aplicação desta técnica ao método do gradiente conjugado permite aumentar as suas eficiência e robustez. Neste contexto, sendo  $\mathbf{P}$  não-singular, pode substituir-se o sistema de equações 7.20 por

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{b}. \quad (7.30)$$

$\mathbf{P} = \mathbf{A}$  é o preconditionador ao qual corresponde uma taxa de convergência mais elevada [Meurant 1999, Benzi 2002]. De facto, neste caso resulta que  $\kappa(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A}) = 1$ . Porém, a determinação de  $\mathbf{P}^{-1}$  corresponde à resolução do sistema 7.20, pelo que esta situação não apresenta qualquer vantagem em relação à resolução directa do problema original. No entanto, depreende-se que a matriz  $\mathbf{P}$  deva aproximar-se da matriz  $\mathbf{A}$ .

Refira-se que, no caso de  $\mathbf{A}$  ser simétrica e definida positiva, a matriz de preconditionamento  $\mathbf{P}$  deve [Meurant 1999]:

<sup>4</sup> $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  dizem-se conjugados de  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , simétrica e definida positiva, se são ortogonais em relação ao produto interno  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\mathbf{A}} \doteq \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y}$ .

<sup>5</sup>O número de condição espectral,  $\kappa$ , de uma matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  é o quociente dos valores próprios máximo ( $\lambda_{\max}$ ) e mínimo ( $\lambda_{\min}$ ) de  $\mathbf{A}$ , *i.e.*  $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ . É ainda comum este valor ser calculado como  $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\max_i |A_{ii}|}{\min_i |A_{ii}|}$ , resultando geralmente em valores mais elevados.

<sup>6</sup>A norma de um vector  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  em relação à matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , simétrica e definida positiva, é  $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{A}} \doteq (\mathbf{x}, \mathbf{x})_{\mathbf{A}}^{1/2} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$ .



1. Ser simétrica e definida positiva;
2. Ter esparsidade semelhante à da matriz  $\mathbf{A}$ ;
3. Ser tal que o sistema  $\mathbf{P}\mathbf{c} = \mathbf{d}$ , com  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ , seja de simples resolução;
4. Ser tal que  $\kappa(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A})$  seja menor do que  $\kappa(\mathbf{A})$ .

Porém, a verificação simultânea de todas estas condições gera frequentemente incompatibilidades, pelo que se torna difícil obter um preconditionador globalmente eficiente. Para mais informações sobre a utilização de preconditionadores em sistemas lineares de grandes dimensões consultar, por exemplo, o trabalho de Benzi [Benzi 2002].

Refira-se que a implementação do Método do Gradiente Conjugado Precondicionado (*Preconditioned Conjugate Gradient* – PCG) utilizada neste trabalho, intitulada de PARCONG (*PARallel CONjugate Gradient solver*), foi desenvolvida por Pinho-da-Cruz [Pinho-da-Cruz 2007]. Para além da versão sem preconditionamento (SP), utilizam-se aqui os seguintes preconditionadores: (i) preconditionamento de Jacobi (JAC), (ii) preconditionamento de sobre-relaxação sucessiva simétrica (*Symmetric Successive Over-Relaxation* – SSOR) e (iii) factorização incompleta de Cholesky (IC0) [Benzi 2002]. Refira-se ainda que, no âmbito deste trabalho, esta implementação foi apenas alterada para permitir o cálculo distribuído, *i.e.* de modo a que possa ser isoladamente executado em nós escravos sem o controlo do nó mestre.

### 7.3 Homogeneização por Expansão Assimptótica

Os procedimentos de homogeneização por expansão assimptótica são utilizados neste trabalho tanto para a determinação de propriedades efectivas de materiais compósitos e celulares quanto na determinação de sensibilidades locais em processos de optimização multiescala (*vd.* Cap. 6).

#### 7.3.1 Cálculo de Correctores

As soluções  $\Upsilon$ ,  $\chi$  e  $\Psi$ , das equações 6.31, 6.38 e 6.39, são designadas por correctores e correspondem, respectivamente, às matrizes de deslocamentos termocaracterísticos e de deslocamentos característicos, e ao vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva. Estes podem ser interpretados como modos próprios de variação das propriedades locais nos respectivos problemas. A discretização destas equações pode escrever-se como, respectivamente,

$$\int_{Y^e} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} \tilde{\mathbf{M}} \, dY \, \Upsilon = \mathbf{F}^k, \quad (7.31)$$

$$\int_{Y^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, dY \, \chi = \mathbf{F}^D \quad e \quad (7.32)$$

$$\int_{Y^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, dY \, \Psi = \mathbf{F}^\beta, \quad (7.33)$$

onde

$$\mathbf{F}^k = \int_{Y^e} \tilde{\mathbf{M}}^T \mathbf{k} \, dY, \quad (7.34)$$

$$\mathbf{F}^D = \int_{Y^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \, dY \quad e \quad (7.35)$$

$$\mathbf{F}^\beta = \int_{Y^e} \mathbf{B}^T \beta \, dY. \quad (7.36)$$

O superíndice  $e$  representa quantidades elementares associadas ao domínio da célula unitária discretizado em elementos finitos (corpo  $Y$ ) [Chung *et al.* 2001].  $\tilde{\mathbf{M}}$  e  $\mathbf{B}$  são as matrizes das derivadas

parciais das funções de forma, para os campos de temperaturas e de deslocamentos, respectivamente.  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{D}$  e  $\boldsymbol{\beta}$  são as matrizes locais de condutividade térmica, de elasticidade e dos módulos térmicos, respectivamente. Em problemas de otimização topológica, estas são substituídas pelo respectivo modelo de material, dependente da densidade local (*vd.* Eqs. 6.72, 6.52 e 6.53, respectivamente). Por sua vez,  $\mathbf{F}^k$  e  $\mathbf{F}^D$  são as matrizes dos vectores de solicitações termocaracterísticas e de solicitações mecânicas características, respectivamente. As colunas destas matrizes constituem vectores de coeficientes independentes. Estes definem respectivamente dois e três, ou três e seis sistemas de equações lineares, caso seja um problema bi- ou tridimensional.  $\mathbf{F}^\beta$  é o vector de solicitações termoelastocaracterísticas, a que corresponde um único sistema de equações lineares. As soluções destes sistemas de equações correspondem às colunas dos correctores correspondentes. As colunas de  $\mathbf{F}^k$ ,  $\mathbf{F}^D$  e  $\mathbf{F}^\beta$  surgem por integração dos gradientes das propriedades dos materiais que constituem a célula representativa unitária. Note-se ainda que as equações 7.32 e 7.33 podem ser resolvidas com a mesma construção de sistema, já que apresentam a mesma matriz de coeficientes e diferem apenas nos correspondentes vectores de termos independentes.

### 7.3.2 Matrizes Constitutivas Homogeneizadas

As matrizes homogeneizadas de condutividade térmica  $\mathbf{k}^h$  e de elasticidade  $\mathbf{D}^h$  são calculadas com o método dos elementos finitos, a partir das equações 6.30 e 6.36, como

$$\mathbf{k}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \mathbf{k}^k \left( \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^k \boldsymbol{\Upsilon}^k \right) \quad \text{e} \quad (7.37)$$

$$\mathbf{D}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \mathbf{D}^k \left( \mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k \right), \quad (7.38)$$

respectivamente.  $Y^k$ ,  $Y$  e  $n_e$  são os volumes de um elemento finito genérico  $k$ , o volume total da célula representativa unitária e o número de elementos finitos da CRU, respectivamente.  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade. O vector homogeneizado dos módulos térmicos  $\boldsymbol{\beta}^h$  corresponde, de acordo com a equação 6.37, a

$$\boldsymbol{\beta}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \left( \boldsymbol{\beta}^k - \mathbf{D}^k \mathbf{B}^k \boldsymbol{\Psi}^k \right). \quad (7.39)$$

O vector homogeneizado dos coeficientes de dilatação térmica  $\boldsymbol{\alpha}^h$  pode também ser obtido, de acordo com a relação 4.16 e assumindo a não singularidade de  $\mathbf{D}^h$ , calculando

$$\boldsymbol{\alpha}^h = \left( \mathbf{D}^h \right)^{-1} \boldsymbol{\beta}^h. \quad (7.40)$$

O superíndice  $k$  refere-se a quantidades elementares. Note-se ainda que se o gradiente de um dos correctores for nulo, a matriz constitutiva homogeneizada resulta na sua média volúmica na micro-escala. As matrizes homogeneizadas são posteriormente utilizadas na macroescala como informação constitutiva ou utilizadas isoladamente na análise de propriedades dos materiais representados.

É ainda conveniente referir que, quando se trata da homogeneização de distribuições de material resultantes de um processo de otimização topológica (*vd.* Secs. 6.4.1 e 6.4.3), as equações 6.71 e 6.73 correspondem, respectivamente, a

$$\mathbf{k}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \mu_k^p \mathbf{k}^0 \left( \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^k \boldsymbol{\Upsilon}^k \right) \quad \text{e} \quad (7.41)$$

$$\mathbf{k}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \left( \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^k \boldsymbol{\Upsilon}^k \right)^T \mu_k^p \mathbf{k}^0 \left( \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{M}}^k \boldsymbol{\Upsilon}^k \right). \quad (7.42)$$

As equações 6.54 e 6.56, por sua vez, correspondem a

$$\mathbf{D}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \mu_k^p \mathbf{D}^0 (\mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k) \quad (7.43)$$

e a

$$\mathbf{D}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} (\mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k)^T \mu_k^p \mathbf{D}^0 (\mathbf{I} - \mathbf{B}^k \boldsymbol{\chi}^k), \quad (7.44)$$

respectivamente. Por sua vez, a equação 6.55 corresponde a

$$\boldsymbol{\beta}^h = \sum_{k=1}^{n_e} \frac{Y^k}{Y} \left( \mu_k^{2p} \boldsymbol{\beta}^0 - \mu_k^p \mathbf{D}^0 \mathbf{B}^k \boldsymbol{\Psi}^k \right). \quad (7.45)$$

Note-se que as formas quadráticas [Bendsøe 1995] 7.42 e 7.44 são particularmente relevantes em otimização topológica, garantindo a simetria das matrizes homogeneizadas correspondentes mesmo em casos de existência de fases desconexas.

### 7.3.3 Localização

Os campos microestruturais de fluxos superficiais de calor por condução, de deformação e de tensão, num determinado ponto de integração de um elemento finito da macroescala, podem calcular-se, de acordo com as equações 6.40, 6.41 e 6.43, como

$$\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{k}^e \left( \tilde{\mathbf{M}}^e \boldsymbol{\Upsilon} - \mathbf{I} \right) \tilde{\mathbf{M}}^E \mathbf{T}^{(0)}, \quad (7.46)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{B}^e \boldsymbol{\chi}) \mathbf{B}^E \mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{B}^e \boldsymbol{\Psi} \left( T^{(0)} - T_0 \right) \quad e \quad (7.47)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)} = \mathbf{D}^e (\mathbf{I} - \mathbf{B}^e \boldsymbol{\chi}) \mathbf{B}^E \mathbf{u}^{(0)} + (\mathbf{D}^e \mathbf{B}^e \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\beta}^e) \left( T^{(0)} - T_0 \right), \quad (7.48)$$

respectivamente. O superíndice  $e$  denota quantidades elementares microestruturais e o superíndice  $E$  quantidades elementares macroestruturais. A CRU onde é feita a localização fornece campos locais para os valores macroestruturais obtidos num ponto de integração do elemento  $E$ .  $T_0$  é a temperatura de referência e  $T^{(0)}$  a temperatura global do material homogeneizado em  $E$ .  $\mathbf{u}^{(0)}$  é o campo macroestrutural de deslocamentos.

### 7.3.4 A Sub-Rotina Slavery

As metodologias multiescala utilizadas neste trabalho utilizam células representativas unitárias como elementos de análise das microestruturas periódicas dos materiais estudados. Para além da periodicidade geométrica destas CRU, é também necessário garantir que a deformada seja periódica. Assim, deve existir continuidade entre células vizinhas e, conseqüentemente, entre regiões geométricas opostas de uma CRU, quer para a geometria original quer para a sua deformada [Böhm 2012]. A periodicidade da deformada de uma CRU depende da imposição de condições de fronteira de periodicidade (*vd.* Sec. 7.2.2). Neste sentido, os nós das fronteiras geométricas devem ser associados de forma a garantir que os deslocamentos sejam compatíveis com as células vizinhas, *i.e.* com as regiões que, por periodicidade, correspondam às mesmas interfaces de células adjacentes. De forma a automatizar esta associação de graus de liberdade, desenvolveu-se um algoritmo que estabelece índices de associação entre nós pertencentes a fronteiras geométricas de CRU tridimensionais de arestas ortogonais, independentemente das suas dimensões [Oliveira *et al.* 2008, Oliveira *et al.* 2009a]. Posteriormente, este algoritmo foi actualizado para permitir o processamento de CRU prismáticas de secção hexagonal [Oliveira *et al.* 2009b]. Neste caso, a análise das interfaces entre

células adjacentes acarreta algumas complexidades adicionais, nomeadamente na determinação do lugar geométrico dos nós correspondentes. Este procedimento foi ainda estendido ao processamento de CRU bidimensionais, quadrangulares e hexagonais. Nas figuras 7.6 e 7.7 ilustra-se o processo de associação para células cúbicas ou paralelepipedicas, e para células hexagonais, respectivamente.

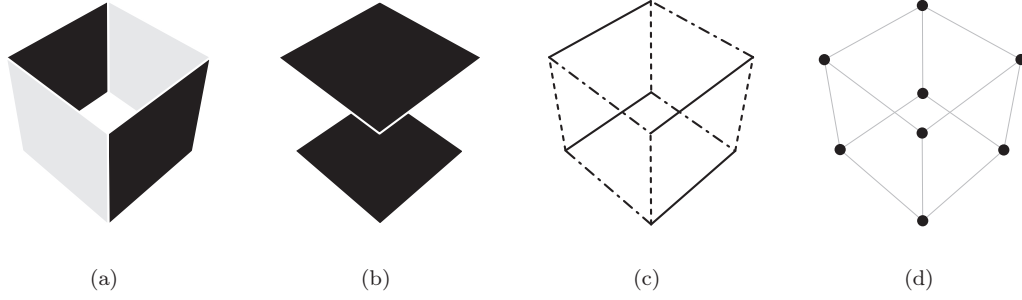


Figura 7.6: Regiões de associação para a periodicidade de uma célula unitária cúbica ou paralelepipedica: (a,b) faces, (c) arestas e (d) vértices.

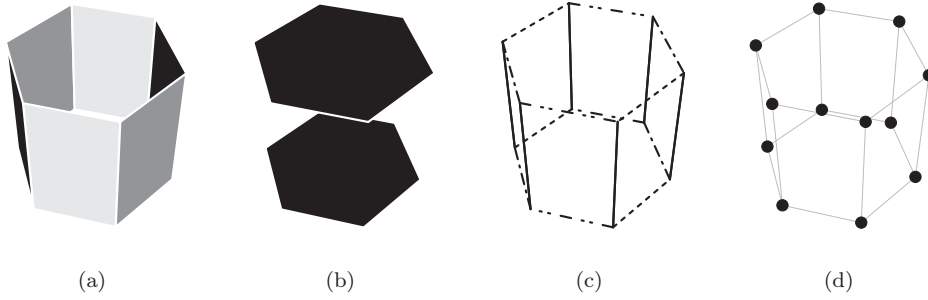


Figura 7.7: Regiões de associação para a periodicidade de uma célula unitária hexagonal: (a,b) faces, (c) arestas e (d) vértices.

Atenda-se ainda ao facto de na imposição de condições de fronteira de periodicidade em malhas estruturadas de elementos finitos ser sempre possível encontrar correspondência entre nós de regiões associadas por estes se localizarem em lugares geométricos coincidentes. Em contrapartida, no caso de malhas não-estruturadas, a distribuição de nós não é necessariamente idêntica em regiões de controlo e em regiões dependentes, pelo que a associação automática de graus de liberdade envolve normalmente aproximações em termos da posição geométrica de nós dependentes. Esta aproximação, no entanto, pode ser feita sem prejuízo para os resultados numéricos em procedimentos de homogeneização por expansão assintótica [Oliveira *et al.* 2008, Oliveira *et al.* 2009a].

## 7.4 Optimização Topológica

A optimização topológica, como elemento basilar deste trabalho, é resumida ao longo das secções seguintes. Sem se ser demasiado exaustivo em termos de detalhes de implementação, pretende-se que a abordagem aqui apresentada forneça uma visão geral da estrutura implementada e de algumas opções tomadas em termos computacionais.

### 7.4.1 Metodologia Geral

A estrutura típica de um programa de optimização topológica pode ser ilustrada pelo fluxograma da figura 7.8. Os diversos problemas de optimização apresentados nas Secções 5 e 6 seguem, com as devidas adaptações, a mesma estrutura. A implementação modular seguida neste trabalho permite que diversas alternativas de cálculo sejam activadas/desactivadas de acordo com as opções seleccionadas, permitindo que esta estrutura geral seja respeitada. Nesse sentido, esta figura pretende servir de base para as diferentes descrições de procedimentos de optimização ao longo das secções seguintes. Assim, cada uma das partes do núcleo Geral de um algoritmo de optimização topológica (**G**) foi demarcada para que possa ser correcta e separadamente detalhada quando necessário. Estas partes designam-se aqui, em termos genéricos, como: (i) definição de propriedades (**P**), (ii) análise do problema (**A**), (iii) avaliação de sensibilidades e função-objectivo (**S**), (iv) actualização das variáveis de optimização (**O**) e (v) avaliação de convergência (**C**).

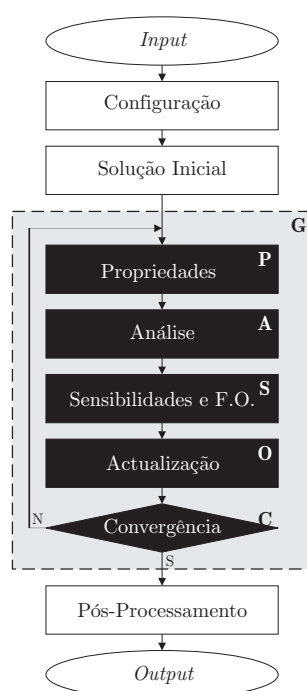


Figura 7.8: Fluxograma geral de um algoritmo de optimização topológica em cálculo estrutural.

Podemos então descrever-se o algoritmo geral de um problema de optimização topológica. Independentemente da sua organização ou mesmo do tipo de análise, o primeiro passo corresponde sempre à fase de introdução de dados (*input*). No programa mainFRAN, esta é feita com recurso a diversos ficheiros de dados. Um ficheiro sempre presente designa-se por `solve.prm` e contém toda a informação de configuração e parametrização da execução. A este são acrescentados diversos ficheiros de dados, específicos de cada problema a resolver. Estes ficheiros são gerados a partir de configurações personalizadas do *software* GiD, separados entre ficheiros de geometria de malha, para estrutura e CRU, modos de carga, prescrição de condições de fronteira e densidades prescritas, dados térmicos, *etc.* Todos estes dados são utilizados numa fase de configuração inicial do programa e de pré-processamento interno, onde se estabelecem todos os parâmetros que irão condicionar o fluxo de instruções específicos de determinada execução e se procede à primeira fase de dimensionamento e alocação dinâmica de memória, assim como iniciação de variáveis. É também nesta fase que se organizam diversas partes dos problemas de optimização e elementos finitos. Em

problemas de optimização, é então definida uma solução inicial, com uma distribuição de material sobre a qual é iniciada a análise. Em termos macroestruturais, esta corresponde usualmente a uma distribuição uniforme com densidade igual à fracção volúmica imposta como restrição. Note-se que, caso sejam utilizadas densidades prescritas, esta distribuição é ajustada de modo a que a solução inicial respeite a restrição de volume.

Depois do conjunto de tarefas necessárias à configuração inicial do problema, entra-se no bloco central do fluxo de instruções (**G**), correspondente à resolução efectiva dos problemas de optimização. Convém neste ponto salientar que esta estrutura continua a ser válida em problemas que não envolvam optimização. Na resolução isolada de problemas de elementos finitos, com ou sem homogeneização, a parte iterativa deste bloco central deixa de existir, assim como as tarefas associadas especificamente ao problema de optimização, sem, no entanto, se alterar a estrutura do programa. A etapa seguinte, designada de definição de propriedades, corresponde à fase de definição constitutiva. Num problema exclusivamente macroestrutural, esta designação é meramente indicativa, já que as propriedades dos materiais (isotrópicos) são predefinidas e as matrizes constitutivas são definidas dentro dos procedimentos de construção dos sistemas de equações. Em procedimentos multiescala, por sua vez, esta etapa adquire dimensões que tendem a sobrepor-se ao resto da execução em termos de requisitos computacionais. Como se verá ao longo das secções seguintes, para além dos cálculos associados à determinação da matrizes constitutivas de uma ou várias distribuições de material constituinte, esta etapa pode ainda envolver tarefas de optimização local, com cálculos de sensibilidades e actualização da distribuição de material. Tudo isto em elasticidade ou termoelasticidade (lineares). Segue-se a resolução do problema macroestrutural de elementos finitos. Este envolve as tarefas de construção de rigidez, definição de condições de fronteira e resolução do sistema de equações (térmico, mecânico ou termomecânico). Surgem aqui, no entanto, algumas especificidades. No que diz respeito à definição dos sistemas de equações, se o problema de optimização for exclusivamente macroestrutural, a sua construção é simplificada após a primeira iteração. Para o efeito, a rigidez de cada um dos elementos finitos pode ser construída apenas na primeira iteração e armazenada em memória, permitindo que seja apenas afectada pela sua densidade penalizada em cada iteração. Esta opção é válida para diversas grandezas que dependam da densidade do material, nomeadamente a componente constitutiva dos carregamentos térmicos elementares no problema termoelástico. Estes, aliás, são sempre construídos com base no campo de temperaturas determinado pela resolução do problema térmico e nas propriedades do material (isotrópico ou homogeneizado) utilizado. Note-se ainda que estes carregamentos são apenas calculados em problemas de termoelasticidade. Quando o problema é térmico ou multiobjectivo, com objectivos térmico e puramente mecânico, o vector de carregamentos termomecânicos,  $\mathbf{F}_t$ , não é calculado (*vd.* Fig. 7.9). Refira-se ainda que, se o problema envolve microestruturas que evoluem ao longo do processo iterativo, as definições constitutivas dos diversos problemas a resolver têm de ser recalculadas em cada iteração e para cada elemento finito, tornando o processo computacionalmente mais oneroso. Obtidas as soluções dos problemas, é então possível avaliar o estado actual do problema de optimização. Por um lado, a função-objectivo pode então ser avaliada. Por outro lado, tarefa mais importante por ser aquela que efectivamente controla o processo de optimização, é então possível calcular as sensibilidades desta a alterações de cada uma das variáveis de optimização. Esta análise de gradientes, por sua vez, permite a utilização de algoritmos de optimização para obter uma correcta actualização das variáveis de optimização, isto é, das densidades elementares. O campo de densidades, a função-objectivo e outras variáveis relevantes são então comparados com os de iterações anteriores para tirar ilações sobre o processo de convergência e determinar a necessidade de uma nova iteração. Em cada iteração, se necessário, utilizar-se-ão as novas variáveis para efectuar uma nova avaliação de estado de todo o problema e conduzir a novas soluções até que o óptimo seja atingido.

Fora já do bloco central de optimização no fluxograma genérico apresentado, surge a tarefa de pós-processamento e obtenção de resultados (*output*). Estas são essencialmente ilustrativas, já que no programa aqui discutido o pós-processamento é distribuído ao longo do processo iterativo. Para evitar o armazenamento excessivo de dados, assim como para permitir um acompanhamento

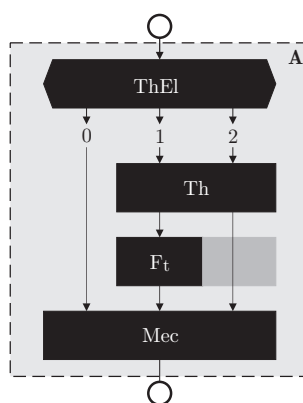


Figura 7.9: Fluxograma de resolução dos problemas de termoelasticidade.

intermédio da evolução do cálculo, diversas regiões intermédias têm tarefas de tratamento e escrita associadas. Estas dividem-se por ficheiros de resultados de optimização macroestruturais, de optimização microestruturais, de homogeneização e de localização.

#### 7.4.2 Optimização Multiobjectivo

A optimização multiobjectivo surge neste trabalho de duas formas distintas. Por um lado como problemas de carregamentos mecânicos múltiplos<sup>7</sup>. Por outro lado, como problemas de obtenção de óptimos de Pareto com ponderação de objectivos térmicos e mecânicos. Ambos seguem a metodologia de soma ponderada (*vd.* Eq. 2.25) de modo a controlar o peso de cada um dos objectivos no objectivo global. Além disso, ambos seguem o esquema de normalização apresentado na equação 5.9. Isoladamente, sendo um problema linear, é a morfologia e não a magnitude das condições de fronteira associadas a cada objectivo que determinam a topologia resultante. No entanto, quando ponderadas com outros objectivos, a magnitude das funções-objectivo pode originar objectivos incorrectamente dominantes. Esta afirmação é válida para casos de multicarregamento, mas particularmente relevante em casos de multiobjectivos térmico e mecânico. Aqui, como se comparam grandezas e fenómenos físicos de natureza diversa, as magnitudes dos objectivos podem tornar a ponderação completamente inconsistente. Assim, a normalização dos objectivos é realizada, em qualquer um dos casos, para garantir que a ponderação é controlada pelo peso definido pelo utilizador e não pela magnitude original dos problemas associados. Mais ainda, a normalização apresentada é estendida a todos os objectivos, mesmo que processados de forma isolada. Assim, cada função-objectivo passa a definir-se como  $F = \frac{f}{f_0}$ . Esta opção é tomada para garantir que os problemas definidos se encontram sempre dentro da gama de actuação dos algoritmos de optimização utilizados, tornando-os independentes da magnitude das solicitações impostas. Note-se ainda que a implementação do caso multicarregamento, neste programa, resume-se a modos de carga alternativos, sem alteração de condições de fronteira essenciais. Isto deve-se ao facto de permitir assim que o sistema de equações seja mantido em cada resolução, bastando actualizar o vector de forças e repetir a resolução do sistema.

<sup>7</sup>A designação de problemas multicarregamento como sendo multiobjectivo não é usual. No entanto, é aqui adoptada pelo facto da optimização multiobjectivo poder ser também designada de optimização vectorial e, neste contexto, o problema multicarregamento fazer uso do mesmo tipo de metodologia [Bendsøe e Sigmund 2003].



### 7.4.3 Filtros

Utilizam-se aqui filtros de sensibilidade ( $F\#$ ) e de densidade ( $Fx\#$ ), apesar deste trabalho se focar essencialmente nos filtros de sensibilidade (*vd.* Sec. 5.4.1). Apesar das suas implementações serem próximas, com parte dos procedimentos comuns aos dois casos, verifica-se que os filtros de densidade tendem a deteriorar a periodicidade das microestruturas obtidas em procedimentos multiescala. Esta limitação poderia ser contornada incluindo as fronteiras de periodicidade no procedimento de filtragem. No entanto, os filtros de sensibilidade não são tão sensíveis neste aspecto, razão pela qual são preferidos neste caso. Numa primeira fase, comum a qualquer dos filtros utilizados, é efectuada uma avaliação geral da malha. Nesta fase, a mais onerosa do processo de filtragem, toda a malha de elementos finitos é avaliada de modo a calcular e armazenar distâncias entre elementos e sequências de conectividade. Estes cálculos destinam-se a preparar o cálculo para a utilização das diferentes opções de filtragem. A forma mais simples e comum permite que a filtragem seja feita directamente com o operador de convolução e entre os elementos contidos na vizinhança definida pelo raio do filtro ( $F1$ ). Esta forma de actuação pode representar alguns problemas, nomeadamente a inclusão de regiões geometricamente próximas, mas sem ligação física [Desmorat 2007]. Para evitar este problema, os restantes filtros foram alterados de modo a só incluir elementos em determinada vizinhança se estiverem efectivamente ligados. Nesse sentido, utilizam-se neste trabalho essencialmente filtros de conectividade. Constrói-se uma lista de todos os elementos com conectividade a um dado elemento, assim como as respectivas distâncias entre centros geométricos. O processo de filtragem actua então apenas sobre os elementos admissíveis, mesmo que a distância seja inferior ao raio definido para a vizinhança,  $R_f$ . Distinguem-se aqui três modos principais de funcionamento. Por um lado, utiliza-se um modo que inclui apenas os elementos directamente ligados ao elemento sobre o qual actua o filtro ( $F2$ ). Continua a ser possível actuar sobre os pesos de ponderação através do raio de filtragem e do operador de convolução, mas sempre com os elementos mais próximos. Neste caso, o raio definido pelo utilizador vai ser variável. Este deixa de ser o raio absoluto referido anteriormente,  $R_f$ , e passa a ser definido como raio relativo,  $\bar{R}_f$ , cuja unidade corresponde à distância mínima entre cada elemento e os seus vizinhos. Consegue-se assim garantir que o filtro funciona de forma equilibrada independentemente da regularidade das malhas, ou da dimensão do problema e elementos utilizados. Contudo, este funciona muitas vezes apenas como um filtro de limitação de fenómenos *checkerboard*, já que à medida que as malhas são refinadas tendem a surgir efeitos cada vez mais pronunciados de dependência de malha. Duas alternativas de funcionamento suplementares permitem um maior controlo sobre este efeito, conduzindo a melhores resultados em termos de independência de malha. Incluindo na vizinhança de elementos admissíveis camadas suplementares de elementos com conectividade, isto é, de elementos com conectividade com elementos vizinhos, é possível alargar a actuação destes filtros de conectividade e controlar a sua actuação. Os raios definidos para esta vizinhança são aqui definidos de duas formas. Por um lado, pode utilizar-se o raio proporcional referido anteriormente. Este pode ser específico para cada elemento ( $F3$ ), de modo a actuar de forma equilibrada em malhas não-regulares, ou ser definido como igual para toda a malha ( $F4$ ). Por outro, pode utilizar-se um raio absoluto, levando a que a dimensão da vizinhança seja definida independente do refinamento da malha ( $F5$ ). Note-se que estes diferentes níveis de controlo podem originar efeitos perversos. Se por um lado é possível controlar o surgimento de algumas instabilidades numéricas ou fenómenos de dependência de malha, por outro acaba-se muitas vezes por destruir a resolução das soluções obtidas, quer em termos de aproximação à solução do problema discreto quer em termos de detalhe estrutural. Assim, é necessário algum cuidado na avaliação destas soluções, já que muitas vezes a validação é feita em termos essencialmente visuais [Rozvany 2009].

### 7.4.4 Algoritmos de Optimização

Neste trabalho são utilizados dois tipos de método de optimização, como referido na Secção 5.6. Utilizam-se métodos de critério de óptimo (OC), com esquemas de actualização de ponto fixo, e o



M todo das Assimptotas M veis (MMA), de Svanberg [Svanberg 1987], assim como uma adapta  o deste para funcionar como CONLIN (*CONvex LINearization*), de Fleury [Fleury 1989].

A aplica  o do m todo de crit rio de  ptimo utilizada neste trabalho baseia-se nas equa  es 5.57, 5.58 e 5.19. No ponto  ptimo pode escrever-se que

$$\frac{-\frac{\partial f}{\partial \rho_e}}{\lambda \frac{\partial g}{\partial \rho_e}} = \frac{p \rho_e^{p-1} \mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e}{\lambda v_e} = 1. \quad (7.49)$$

$v_e$    o volume do elemento finito  $e$ , surgindo de  $\frac{\partial g}{\partial \rho_e} = \frac{\partial V}{\partial \rho_e}$ , onde  $V = \sum v_e \rho_e = \boldsymbol{\rho}^T \mathbf{v}$ . Este ponto   particularmente relevante em malhas n o-regulares. Fisicamente, esta equa  o significa que a fun  o densidade de energia de deforma  o deve ser constante ao longo do dom nio (para densidades interm dias). Recorrendo ao tipo de esquema de ponto fixo apresentado na equa  o 5.60, pode ent o escrever-se, para a itera  o  $k + 1$ ,

$$\rho_e^{(k+1)} = \rho_e^{(k)} \left( \frac{p \rho_e^{p-1} \mathbf{u}_e^T \mathbf{k}_0 \mathbf{u}_e}{\lambda v_e} \right)^\xi = \rho_e^{(k)} \left( B_e^{(k+1)} \right)^\xi. \quad (7.50)$$

$\xi$    um coeficiente de amortecimento. Para limitar a varia  o da vari vel densidade, introduz-se ainda um limite positivo de actualiza  o (*move limit*),  $\zeta$ . Ambos estes coeficientes t m como objectivo estabilizar as itera  es, limitando a dimens o de  $B$  e a varia  o de  $\rho$ , respectivamente. Os seus valores podem variar entre 0 e 1, sendo utilizados como par metros de afina  o de rapidez e estabilidade do processo iterativo. Note-se que, normalmente, o aumento da rapidez acarreta uma redu  o da estabilidade e uma maior propens o para tender para  ptimos locais. Neste trabalho usam-se normalmente valores de  $\xi = 0,5$  e  $\zeta = 0,2$ . Pode assim construir-se o seguinte esquema heur stico de actualiza  o [Sigmund 2001, Bends e e Sigmund 2003]

$$\rho_e^{(k+1)} = \begin{cases} \max \left[ (1 - \zeta) \rho_e^{(k)}, \rho_{min} \right] & \text{se } B_e \rho_e^{(k)} \leq \max \left[ (1 - \zeta) \rho_e^{(k)}, \rho_{min} \right] \\ \min \left[ (1 + \zeta) \rho_e^{(k)}, 1 \right] & \text{se } B_e \rho_e^{(k)} \geq \min \left[ (1 + \zeta) \rho_e^{(k)}, 1 \right] \\ B_e \rho_e^{(k)} & \text{se outros casos} \end{cases}. \quad (7.51)$$

Este procedimento aumenta a densidade em regi es com  $B^{(k)} > 1$  e reduz em regi es com  $B^{(k)} < 1$ . No ponto  ptimo  $B^{(k)} = 1$  para todas as densidades interm dias. Note-se ainda que o multiplicador de Lagrange deve satisfazer a restri  o de volume. A fun  o  $g(\lambda) = V(\rho(\lambda)) - f_v \bar{V}$  tem uma depend ncia mon tona decrescente com  $\lambda$ , pelo que se pode utilizar um algoritmo de bissec  o para actualizar tamb m iterativamente o multiplicador de Lagrange. Esta actualiza  o, na tentativa de garantir que a restri  o de volume   respeitada, conduz ao ciclo iterativo interno representado na figura 7.10. O esquema de actualiza  o determina o correcto  $\boldsymbol{\rho}_{k+1}$  quando  $g(\rho) = 0$ . Note-se que a converg ncia do processo iterativo e do problema de optimiza  o corresponde ao caso em que todos os valores interm dios resultem em  $B_e = 1$  e, conseq entemente, em  $\boldsymbol{\rho}^{(k+1)} = \boldsymbol{\rho}^{(k)}$ .

Refira-se ainda que, apesar de neste trabalho se utilizar o MMA para gerir restri  es m ltiplas,   poss vel estabelecer esquemas de actualiza  o para m todos de crit rio de  ptimo para o mesmo efeito [Venkayya 1989, Fernandes *et al.* 1999, Yin e Yang 2001]. Esta  , ali s, uma das vantagens do MMA relativamente ao m todo OC, permitindo a resolu  o de problemas mais complexos sem altera  es da sua defini  o ou implementa  o. A vers o de 2007, implementada em Fortran e gentilmente cedida por Krister Svanberg [Svanberg 1987], permite uma integra  o simples em c digos de optimiza  o topol gica. Necessita de algumas vari veis auxiliares, mas   flex vel o suficiente para ser adaptada   resolu  o de diversos tipos de problemas. As sub-rotinas utilizadas fornecem ainda diversas vari veis de controlo como *output*, *e.g.* multiplicadores de Lagrange.

O MMA funciona atrav s da lineariza  o das restri  es  $f_i(x)$  (*vd.* Sec. 5.6) com vari veis do tipo  $1/(U - x)$  e  $1/(x - L)$ , dependendo dos sinais das derivadas em  $x$ , com  $L < x < U$  [Svanberg 1987].  $L$  e  $U$  constituem os pontos das asymptotas que controlam o m todo. Estas asymptotas

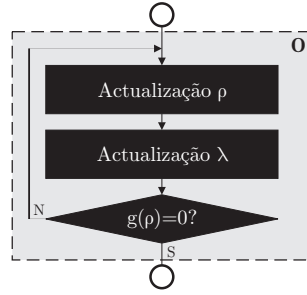


Figura 7.10: Ciclo de iterações internas no OC.

são móveis, já que se vão aproximando à medida que o processo vai convergindo. A manipulação destas asymptotas permite ainda algum controlo do funcionamento do método. Alterando o seu funcionamento para um modelo de asymptotas fixas, é possível obter funções de aproximação características de outros métodos. O intervalo entre  $\mathbf{L}^{(k)}$  e  $\mathbf{U}^{(k)}$  afecta directamente as segundas derivadas dos subproblemas. Se o intervalo definido entre as asymptotas é próximo de  $\mathbf{x}^{(k)}$ , o valor das segundas derivadas das funções de aproximação  $f_i^{(k)}$  (vd. Eq. 5.62) aumenta. Assim, aumenta-se a curvatura das funções de aproximação e torna-se a aproximação ao problema original mais conservadora [Svanberg 1987]. Por outro lado, se este intervalo é definido com limites distantes de  $\mathbf{x}^{(k)}$ , as funções de aproximação aproximam-se de funções lineares. No limite, com as asymptotas  $L_j^{(k)} = -\infty$  e  $U_j^{(k)} = +\infty$ , as funções de aproximação tornam-se idênticas às de um problema de PLS (Programação Linear Sequencial). Por outro lado, um caso intermédio comum corresponde à utilização das asymptotas fixas  $L_j^{(k)} = 0$  e  $U_j^{(k)} = +\infty$ . Neste caso, as funções de aproximação passam a ser idênticas ao método CONLIN [Fleury 1989]. Salienta-se aqui o facto de Krister Svanberg permitir o acesso ao código-fonte do seu MMA [Svanberg 1987]. Esta postura, em linha com algumas tendências emergentes de divulgação científica *open-science*<sup>8</sup>, permite o controlo do funcionamento interno do método. Assim, nesta implementação do MMA, a manipulação destes parâmetros pode ser feita alterando o código-fonte das sub-rotinas originais. Para o efeito, é conveniente controlar um conjunto de variáveis de modo a actuar de acordo com as relações

$$L_j^{(k)} < x_{\min}^{(k)} \leq \alpha_j^{(k)} \leq x_j^{(k)} \leq \beta_j^{(k)} \leq x_{\max}^{(k)} < U_j^{(k)}. \quad (7.52)$$

As variáveis  $\alpha_j^{(k)}$  e  $\beta_j^{(k)}$  são utilizadas como limites de actualização, evitando por um lado que as variáveis se aproximem dos limites definidos pelas asymptotas, evitando assim divisões por 0 (vd. Eq. 5.62), e controlando a agressividade da actualização das variáveis de optimização. É possível actuar directamente sobre cada uma delas ou recorrer ao parâmetro  $s_0 \in [0, 1]$ , definido na implementação de Svanberg por ALBEFA, como

$$\begin{aligned} \alpha_j^{(k)} &= L_j^{(k)} + s_0 \left( x_j^{(k)} - L_j^{(k)} \right) \quad \text{e} \\ \beta_j^{(k)} &= U_j^{(k)} - s_0 \left( U_j^{(k)} - x_j^{(k)} \right). \end{aligned} \quad (7.53)$$

Assim, quanto maior for  $s_0$  mais próximos da variável são colocados os limites de actualização e mais lenta é a sua actualização. O inverso é também verdadeiro. Note-se ainda que este controlo de actualização é válido em qualquer uma das variações do método [Svanberg 1987].

Por sua vez, as restrições múltiplas surgem nesta implementação do MMA de forma natural. Adicionar a um problema com restrição de volume uma restrição de perímetro (vd. Sec. 5.4.2),

<sup>8</sup>A designação *open-science* é uma de diversas classificações para um paradigma diferente de disseminação científica, onde se procura uma maior abertura e um esforço conjunto no desenvolvimento de conhecimento.

por exemplo, corresponde a redimensionar algumas variáveis do problema e a fornecer ao MMA o valor e a derivada da restrição.

## 7.5 Optimização Topológica Multiescala

A integração de procedimentos de homogeneização em problemas de optimização topológica origina uma divisão clara do cálculo em duas partes distintas: a de homogeneização e a de optimização. No entanto, esta afirmação aparentemente evidente reveste-se, no presente contexto, de diversas especificidades. Por um lado, o objectivo de um módulo de homogeneização, nomeadamente de homogeneização por expansão assintótica como aqui utilizado, destina-se a determinar relações constitutivas com base na distribuição de material constituinte. Num cálculo típico, esta avaliação é efectuada uma única vez e armazenada para utilização ao longo do cálculo global. Isto é verdade para um problema de elementos finitos genérico ou para um problema de optimização topológica da macroescala com uma microescala predefinida. Em metodologias mais gerais, no entanto, o processo de homogeneização pode gerar mais informações relevantes, como sensibilidades de variáveis de distribuição local de material. Nestes casos, as distribuições de material, ditas artificiais, exigem repetidas avaliações das propriedades constitutivas dos materiais resultantes, que por sua vez condicionam o comportamento das estruturas que constituem e cujas respostas promovem alterações nas distribuições locais.

Nas secções seguintes abordam-se as diferentes estratégias utilizadas no referido contexto (*vd.* Fig. 6.4). Estas metodologias multiescala de optimização topológica dividem-se em: (i) optimização de uma estrutura constituída por um material com uma dada microestrutura; (ii) optimização simultânea de ambas as escalas; (iii) optimização do material (homogeneização inversa); (iv) optimização da microestrutura para uma determinada aplicação estrutural; (v) optimização simultânea desacoplada de ambas as escalas; (vi) optimização microestrutural simultânea para diferentes subdomínios macroestruturais. Note-se que o primeiro caso não é abordado em detalhe por corresponder à utilização da metodologia geral de optimização topológica, já apresentada anteriormente. A única diferença prende-se com a informação constitutiva. Neste caso, em vez de ser proveniente de uma definição de material isotrópico, é calculada pela avaliação das propriedades equivalentes de uma determinada célula representativa unitária. O controlo do modo de cálculo ao nível da microestrutura é feito, em termos gerais, de acordo com o apresentado na figura 7.11. As alternativas são a definição isotrópica de material (variável `micMAC` = 0), sem cálculo associado à microescala, a definição constitutiva com microestruturas predefinidas (`micMAC` = 1) ou a inclusão de algum tipo de optimização microestrutural (`micMAC` = 2).

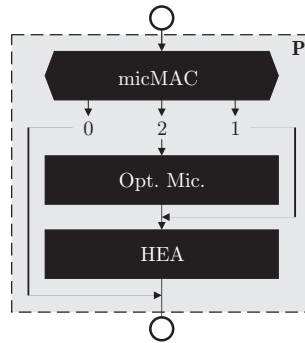


Figura 7.11: Representação esquemática da selecção de modos de funcionamento multiescala do programa mainFRAN.

Refira-se que a abordagem mais frequente do problema de optimização topológica de aproxima-

ção ao problema original discreto, em casos hierárquicos, é apenas aplicável aos problemas locais, seja para materiais celulares seja para materiais compósitos. Pretende-se, aqui, a obtenção de microestruturas perfeitamente definidas, com duas fases distintas, representativas de uma distribuição de material discreta. Por sua vez, a macroescala, pode contemplar valores intermédios de densidade. Estes correspondem a regiões onde a distribuição de material traduz fracções volúmicas locais intermédias. Por sua vez, os limites correspondem a regiões onde se tem vazio (ou material menos rígido) e material isotrópico (ou material de maior rigidez), *i.e.* uma CRU com fracção volúmica local  $f_v = 1$ . Note-se que, do ponto de vista matemático, estes limites poderão criar alguns problemas, visto conduzirem à inexistência de multiplicadores de Lagrange definidos (*vd.* Sec. 6.4.2). Por esta razão, limita-se por vezes a existência destes casos limite, garantindo que as densidades globais nunca são extremas. Um exemplo deste tipo de restrição pode ser visto em aplicações de remodelação óssea, onde se pretende que exista sempre algum material poroso [Coelho *et al.* 2009, Coelho *et al.* 2011b]. Contudo, visto este trabalho visar aplicações estruturais, as regiões sólidas ou de vazio são perfeitamente admissíveis.

Note-se ainda que as discretizações macro- e microestruturais são perfeitamente distintas, quer em termos de geometria quer em termos de tipo de elementos finitos. Assim, existe uma malha de elementos finitos para o problema global, com as condições de fronteira específicas do problema, e uma malha de elementos finitos local, utilizada para cada um dos problemas da microescala e com condições de fronteira específicas (*vd.* Sec. 7.2.2), atribuídas de forma automática para permitir a resolução dos problemas de homogeneização por expansão assintótica associados.

### 7.5.1 Modelos Hierárquicos

A combinação simultânea de optimização local de propriedades equivalentes e optimização espacial da sua distribuição é feita com recurso a procedimentos de resolução hierárquicos. As metodologias utilizadas baseiam-se em estratégias documentadas na bibliografia [Bendsøe 1995, Rodrigues *et al.* 1999, Rodrigues *et al.* 2002, Bendsøe e Sigmund 2003, Coelho *et al.* 2008b, Coelho 2009]. Em particular, Coelho [Coelho 2009] divide estas em estratégias do tipo I e do tipo II. As estratégias do tipo I definem-se por ter como variáveis de optimização independentes as variáveis de densidade microestrutural,  $\mu$ , com as densidades macroestruturais,  $\rho$ , dependentes destas. Por outro lado, as estratégias do tipo II são caracterizadas por dois conjuntos de variáveis de optimização independentes, as densidades microestruturais – calculadas no problema local – e as variáveis macroestruturais – calculadas na resolução do problema global. Estas correspondem explicitamente à divisão do problema em duas escalas distintas definida na formulação hierárquica (*e.g.* Eqs. 6.47 e 6.48). Com este tipo de estrutura, a utilização de outras restrições locais do problema de optimização, para além da restrição de volume, é também mais simples de processar [Coelho *et al.* 2008a].

Estas estratégias conduzem a diferentes alternativas de metodologias de optimização. Por um lado, o fluxo de dados entre as duas escalas depende do tipo de estratégia e dos métodos utilizados. Por outro lado, o controlo do processo de optimização depende directamente destes fluxos de dados. Na figura 7.12 resumem-se os algoritmos adoptados em termos de optimização hierárquica e representam-se estes fluxos. Em qualquer dos casos, estes problemas envolvem sempre uma avaliação local de sensibilidades (*vd.* Eqs. 6.62, 6.63, 6.64 e 6.74) e dos tensores constitutivos (*vd.* Eqs. 6.54, 6.55 e 6.71), assim como a avaliação global de campos macroestruturais de deformação,  $\epsilon$ , e/ou gradientes térmicos  $dT/dx$ . Note-se que estes valores macroestruturais constituem quantidades associadas à macroescala a ser utilizadas no cálculo de sensibilidades da microescala. Estas poderiam ser calculadas ao nível de cada ponto de integração, mas teria como resultado tornar exageradamente oneroso um tipo de cálculo já bastante exigente. Assim, opta-se por calcular valores médios em cada elemento utilizado ao nível da microescala correspondente. Outras questões numéricas dependem já da estratégia adoptada. Se o controlo do processo de optimização for efectuado actuando sobre as variáveis de densidade microestrutural, com as densidades macroestruturais dependentes destas, pode ou não ser necessário que o cálculo global forneça o valor

actual do multiplicador de Lagrange do lagrangiano aumentado,  $\Lambda$ . Tal depende directamente da metodologia de optimização a utilizar, como se verá na secção seguinte. Além disso, as densidades macroestruturais, para cada elemento da macroescala, são obtidas a partir da fracção volúmica local resultante da resolução do problema local correspondente. Se, alternativamente, a optimização for efectuada actuando sobre as densidades micro- e macroestruturais, será necessário que cada microescala forneça o multiplicador de Lagrange associado à restrição de volume local. Esta restrição é imposta tomando como fracção volúmica local o valor da densidade global correspondente. Esta, por sua vez, é calculada com recurso a sensibilidades obtidas a partir do multiplicador local correspondente (*vd.* Eq. 6.65).

Para além destas estratégias gerais, as metodologias aqui apresentadas dividem-se ainda de acordo com o tipo de problema e algumas questões numéricas. As designações H1 e H3 dizem respeito às metodologias gerais de optimização hierárquica (*vd.* Secs. 6.4.1 e 6.4.3), sendo H1 respeitante à aplicação de estratégias do tipo I e H3 a estratégias do tipo II [Coelho *et al.* 2009]. Estas estratégias resumem-se, em termos gerais, na figura 7.13. Assim, os modos H1 controlam o processo de optimização actuando sobre as densidades microestruturais, enquanto os modos H3 actuam em simultâneo sobre as densidades macro- e microestruturais. Adicionalmente, a metodologia H1 tem dois modos distintos de funcionamento. Em qualquer um dos casos, a restrição de volume é controlada ao nível global. Utilizando um algoritmo de OC, este controlo é feito recorrendo ao multiplicador de Lagrange,  $\Lambda$ , do lagrangiano aumentado e os problemas locais podem ser separados por conveniência de implementação. Por sua vez, a utilização de métodos MMA e derivados, leva a que os problemas locais sejam separados ao nível de análise de sensibilidades e avaliação constitutiva mas a actualização de variáveis de densidade microestrutural seja feita em simultâneo com todas as variáveis de todos os problemas locais. Em ambos os casos, a variável de densidade macroestrutural  $\rho$  é dependente das variáveis microestruturais e utilizada apenas para efeitos de pós-processamento. No caso da metodologia H3, em contrapartida, esta variável é uma variável independente, efectivamente actualizada para resolver o problema de optimização. Neste caso, a restrição de volume é respeitada por acção sobre as densidades macroestruturais. Por sua vez, estas funcionam como restrições de volume locais para a resolução dos problemas ao nível da microescala. As variáveis microestruturais são actualizadas na resolução isolada de cada um dos problemas locais. Estes fornecem as sensibilidades ao problema macroestrutural na forma de cada um dos multiplicadores de Lagrange,  $\lambda$ , associados às restrições locais de volume.

Por sua vez, as metodologias H4, H5 e H6, esquematizadas na figura 7.14, correspondem a modos multiescala derivados da homogeneização inversa (*vd.* Sec. 6.5). Os modos H4 e H5 correspondem à optimização da microescala de acordo com a resposta de uma macroescala homogeneizada, com avaliação do campo de deformação macroestrutural em cada iteração do processo de optimização da microescala. O modo H6, por sua vez, constitui um modo de cálculo desacoplado, em que se optimiza em simultâneo, mas de modo independente, as densidades macro- e microestruturais. Neste caso, procura-se na macroescala uma estrutura definida, de material e vazio, e na microescala uma microestrutura (única) para um material celular ou compósito que a constitui. As metodologias H4, H5 e H6 distinguem-se da estratégia hierárquica típica pelo facto de adoptarem uma abordagem mais coerente com a utilização de materiais compósitos. A abordagem hierárquica apresenta evidentes limitações práticas em termos de exequibilidade física das estruturas obtidas. Estas estratégias derivadas pretendem, no entanto, obter apenas uma microestrutura material que permita optimizar a resposta global de uma dada estrutura. Assim, ao contrário da metodologia hierárquica geral, apenas um problema local é resolvido em cada iteração. Neste caso, as sensibilidades locais são calculadas não a partir da localização de respostas macroestruturais mas sim de valores macroestruturais predefinidos. Estes valores podem ser definidos de diferentes formas, desde valores médios a médias ponderadas com valores equivalentes ou mesmo utilizando os valores correspondentes aos pontos mais desfavoráveis. Nos modos H4 e H5 não existe optimização macroestrutural. O problema global destina-se apenas a avaliar o impacto da microestrutura no objectivo global e a fornecer os valores representativos da sua resposta. Neste caso, o material homogeneizado utilizado tem, em cada iteração, as propriedades equivalentes fornecidas pela ho-

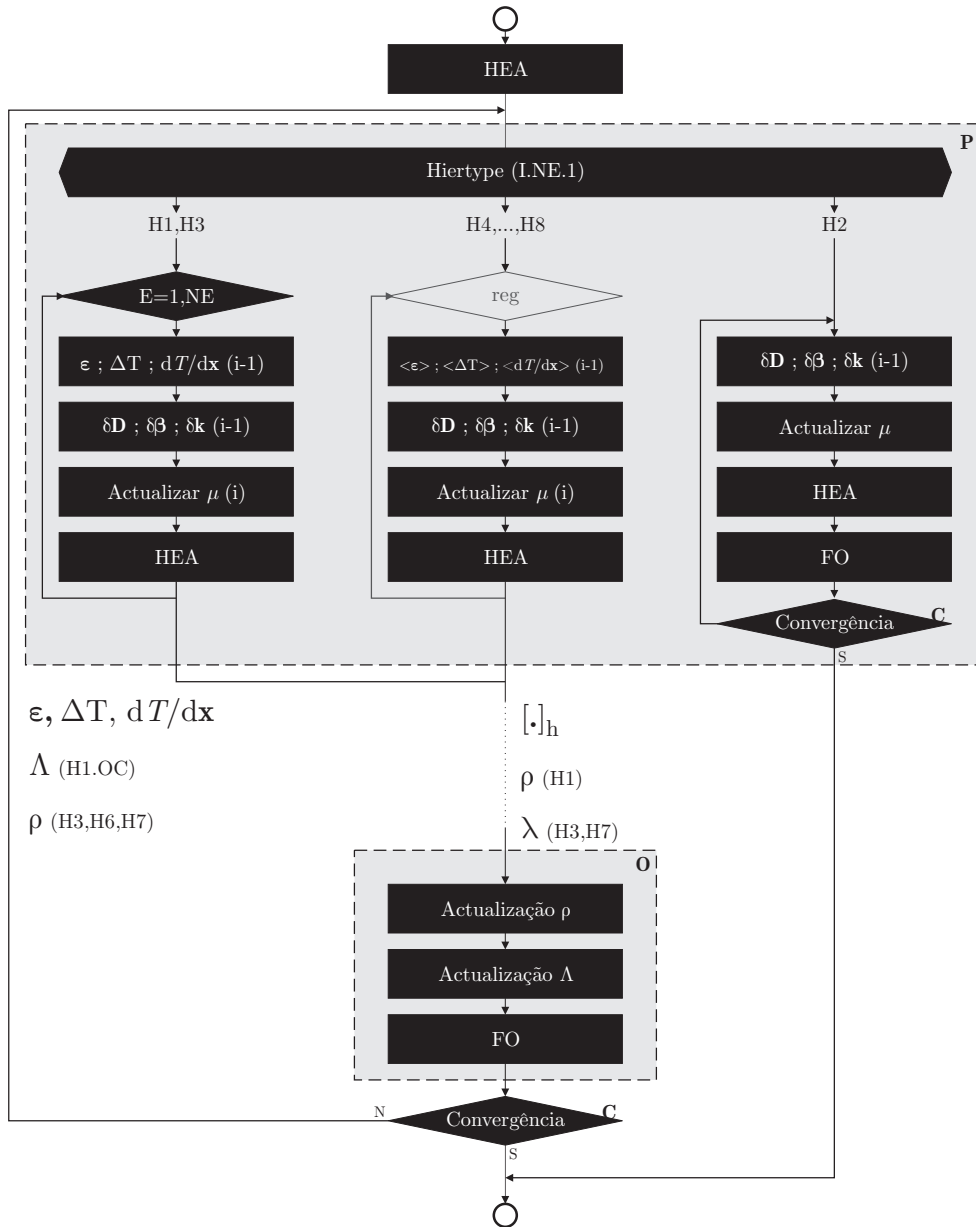


Figura 7.12: Representação esquemática geral dos modos de funcionamento do programa main-FRAN com otimização hierárquica e homogeneização inversa.

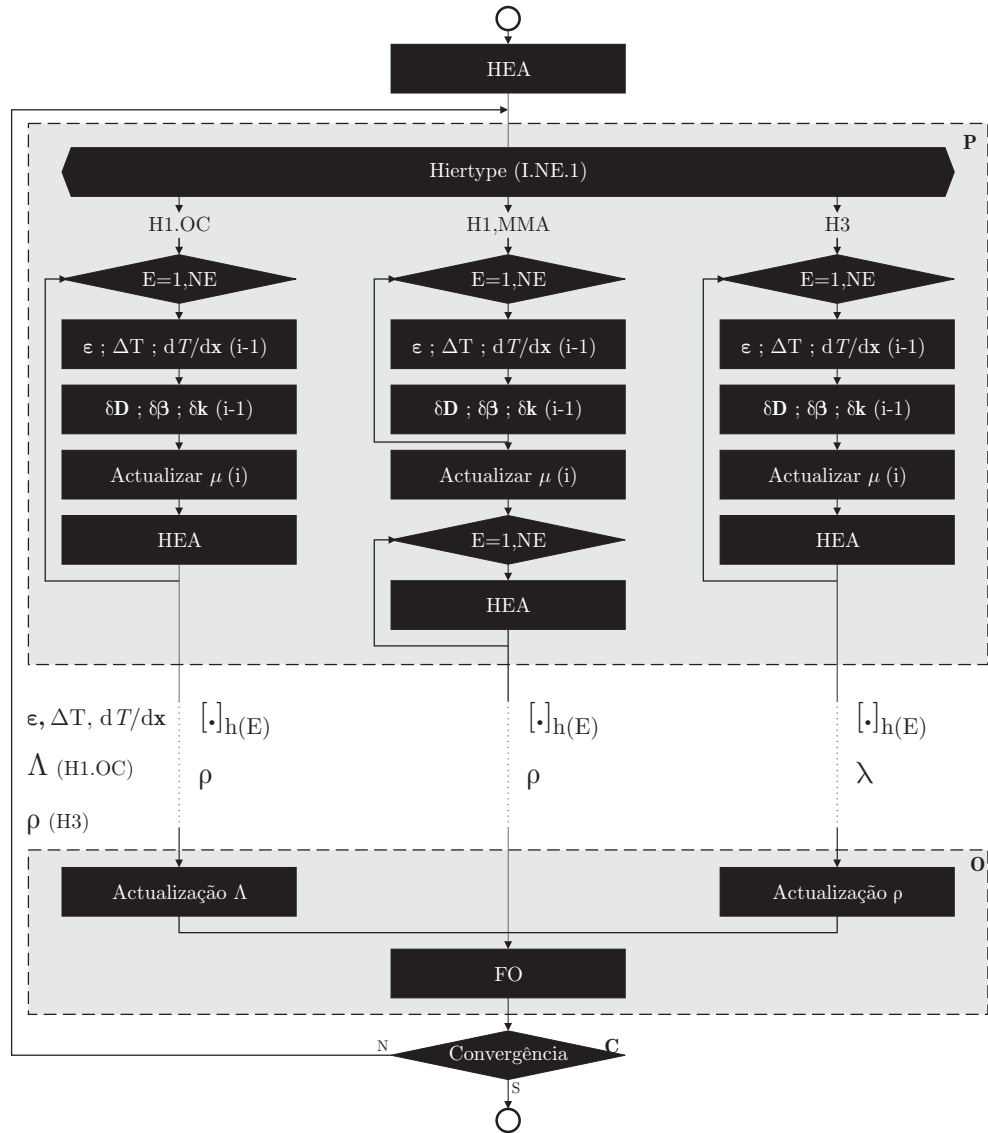


Figura 7.13: Representa  o esquem tica dos modos de optimiza  o hier rquica H1 e H3 do programa mainFRAN.



mogeneização da microestrutura actual. Os modos H4 e H5 distinguem-se apenas pela estrutura adoptada em termos numéricos e são utilizados alternativamente para efeitos comparativos. Estes correspondem, em termos de estrutura e implementação, aos modos gerais H1 e H3, respectivamente. O modo H6, por sua vez, adopta uma estratégia de optimização multiescala desacoplada. Neste caso, o problema local continua a ser único, fornecendo um material ideal para compor o material homogeneizado da macroescala. Esta última, por sua vez, é optimizada como se se tratasse de um problema de optimização macroestrutural com microescala prescrita. Este problema conduz a uma distribuição de material com um esquema de interpolação SIMP, onde se pretende obter uma distribuição discreta entre material e vazio. As regiões onde existe material são constituídas pelo material compósito ideal obtido, em simultâneo, no problema da microescala. A resolução deste é feita da mesma forma que no modo H5, mas o cálculo de valores macroestruturais médios é ainda ponderado pelas correspondentes densidades macroestruturais penalizadas (*vd.* Eq. 6.81). Pretende-se, assim, que apenas as regiões onde exista material tenham influência sobre o problema local. Esta metodologia exige algum cuidado em termos controlo da velocidade de convergência do processo de optimização de cada um dos problemas, já que desequilíbrios a este nível tendem a fazer com que um dos problemas se torne dominante.

Estes modos alternativos de optimização multiescala deram ainda origem a dois esquemas de funcionamento adicionais, o H7 e o H8 (*vd.* Fig. 7.14). Nestes casos, adopta-se uma abordagem por subdomínios da macroescala [Bendsøe 1995, Cherkaev *et al.* 1998], numa estrutura de optimização hierárquica com um número predefinido de problemas locais. Nestes casos, a resolução local utilizando sensibilidades médias, à semelhança dos modos H4 a H6, é feita dentro de cada um dos subdomínios da estrutura global (*vd.* Fig. 6.4(f)). Assim, em vez de uma microestrutura óptima para toda a macroescala ter-se-á um conjunto de microestruturas óptimas, cada uma correspondente a uma região predefinida da macroescala. Estes modos H7 e H8 diferem entre si na resolução do problema global. Enquanto no modo H8 a fracção volúmica global é mantida para toda a estrutura, levando a que não seja necessária a resolução do problema global, no modo H7 o problema global é resolvido em simultâneo. Assim, a densidade macroestrutural é constante e igual à restrição de volume em toda a estrutura quando se trata do modo H8, sendo no caso H7 variável de acordo com cada um dos subdomínios. Neste caso, o funcionamento corresponde essencialmente a um modo H3 com um número de problemas definido não pelo número de elementos finitos da macroescala mas sim pelo número de subdomínios utilizado. Refira-se ainda que estes subdomínios são usualmente definidos *a priori*, no pré-processamento dos problemas, de acordo com regiões avaliadas de acordo com a produção dos componentes em causa. Alternativamente, o programa permite a divisão automática de acordo com o comportamento geral da estrutura (*e.g.* campo de tensões equivalentes ou de tensões principais). Note-se ainda que estes modos de funcionamento coincidem com os H4/5 se se definir apenas uma região macroestrutural.

A homogeneização inversa (H2) corresponde à resolução isolada do problema local de acordo com um campo médio de deformação e/ou gradiente de temperatura impostos (*vd.* Eqs. 6.76 e 6.77). Neste caso, os procedimentos abordados anteriormente resumem-se à região de optimização local. O processo iterativo ocorre apenas dentro do ciclo local, como ilustrado na figura 7.12, sendo terminado de acordo com critérios de paragem aplicados exclusivamente à avaliação do problema local.

Note-se ainda que em qualquer uma das estratégias abordadas (H1 a H8) existe apenas uma iteração de cada um dos problemas associados por cada iteração do problema de optimização.

### 7.5.2 Algoritmos de Optimização Hierárquica

Na sua essência, os problemas de optimização multiescala aqui apresentados são semelhantes aos problemas de optimização topológica macroestrutural. Envolvem a minimização da flexibilidade (mecânica ou térmica) por acção na distribuição de material. No entanto, esta distribuição de material manifesta-se em duas escalas, através da existência de densidades macroestruturais  $\rho$  definidas em cada elemento finito da estrutura global,  $e_x$ , e de densidades microestruturais  $\mu$



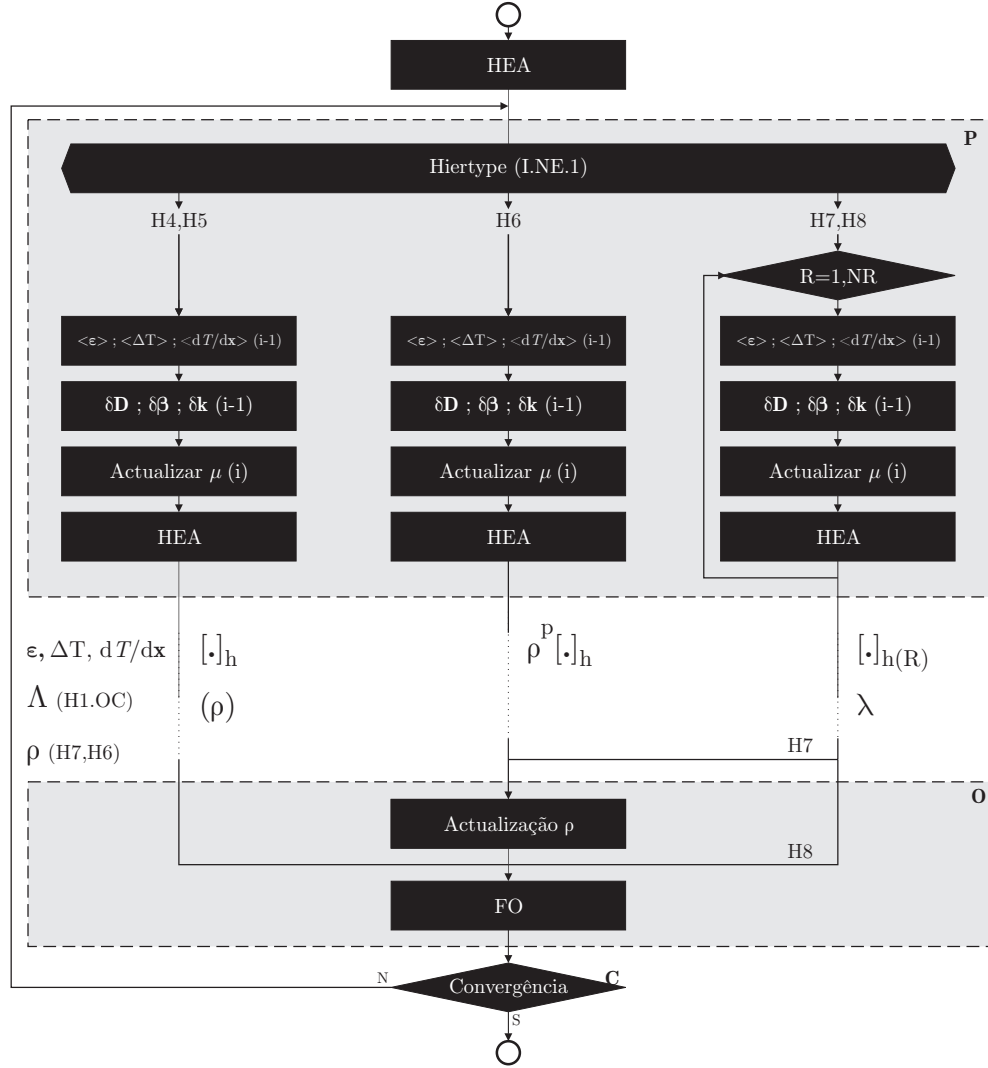


Figura 7.14: Representa  o esquem tica dos modos de optimiza  o hier rquica H4 a H8 do programa mainFRAN.

definidas em cada elemento finito de cada célula representativa unitária,  $e_y$ . No caso geral, este problema é então constituído por uma malha de  $N_{e_x}$  elementos finitos da macroescala e por  $N_{e_x}$  malhas de  $N_{e_y}$  elementos finitos de cada microescala. Cada elemento macroestrutural tem um problema microestrutural associado, correspondendo então a  $N_{e_x} \times N_{e_y}$  variáveis de optimização no total. Para cada elemento finito macroestrutural e o correspondente problema local, a densidade global e as densidades locais relacionam-se através da restrição de volume local 6.51.

A aplicação directa dos critérios de óptimo descritos na Secção 6.4.2 pode conduzir à aplicação de uma metodologia de critério de óptimo. De modo semelhante ao esquema iterativo apresentado no método de critério de óptimo da Secção 7.4.4, pode definir-se, no ponto óptimo, o multiplicador (*vd.* condição de estacionariedade da equação 6.67)

$$\gamma^{e_y} = \frac{\Pi}{2\Lambda_t}. \quad (7.54)$$

A função  $\Pi$  caracteriza a sensibilidade local à variação de  $\mu$  no elemento  $e_y$  da microescala correspondente ao macroelemento  $e_x$  e pode definir-se como

$$\Pi = \sum_{r=1}^M \left\{ w_r \left[ \frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu(y)} \langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}^r) \rangle_{e_x} \langle \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}^r) \rangle_{e_x} \right] \right\} \quad (7.55)$$

para o problema elástico com  $M$  carregamentos múltiplos com peso  $w_r$ .  $\langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}^r) \rangle_{e_x}$  é a deformação macroestrutural do elemento  $e_x$ , localizada para permitir o processamento do problema local. Esta poderia ser integrada ao longo do elemento ou, opção tomada neste trabalho, recorrendo a um valor médio. Em termos numéricos, tomando como exemplo um problema com material e vazio, esta equação é equivalente a

$$\Pi = \sum_{r=1}^M \left\{ w_r \varepsilon_r^{(0)T} \left[ \frac{1}{|Y|} p \mu^{p-1} \mathbf{D}^0 (\mathbf{I} - \mathbf{B}\chi) \right] \varepsilon_r^{(0)} \right\} \quad (7.56)$$

ou, na definição quadrática, a

$$\Pi = \sum_{r=1}^M \left\{ w_r \varepsilon_r^{(0)T} \left[ (\mathbf{I} - \mathbf{B}\chi)^T \left( \frac{1}{|Y|} p \mu^{p-1} \mathbf{D}^0 \right) (\mathbf{I} - \mathbf{B}\chi) \right] \varepsilon_r^{(0)} \right\}. \quad (7.57)$$

Uma das vantagens dos procedimentos aqui apresentados é que o algoritmo principal é independente da modelação do material utilizado ou mesmo, para os casos aqui estudados, do tipo de problema analisado [Bendsøe e Sigmund 2003]. Assim, as expressões apresentadas continuam a ser válidas para o caso do problema de termoelasticidade, onde

$$\Pi = \frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu(y)} \langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \langle \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} - 2 \frac{\partial \beta_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu(y)} \langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \langle \Delta T \rangle_{e_x}, \quad (7.58)$$

ou para o problema térmico, com

$$\Pi = \frac{\partial k_{ij}^h(\mu)}{\partial \mu(y)} \langle T_i' \rangle_{e_x} \langle T_j' \rangle_{e_x}, \quad \text{com} \quad T_k' = \frac{\partial T}{\partial x_k}. \quad (7.59)$$

Omite-se, nestes casos e por uma questão de simplificação, a definição de solicitações múltiplas. Por sua vez, o problema multiobjectivo térmico e termoelástico também pode ser resolvido com recurso às metodologias apresentadas. Para o efeito, visto que as respectivas funções-objectivo são ponderadas (*vd.* Eq. 6.75), as sensibilidades devem ser ponderadas da mesma forma, como

$$\Pi = w_t \Pi_t + w_m \Pi_m. \quad (7.60)$$

O parâmetro  $\gamma^{e_y}$  é equivalente, em termos de aplicação, ao parâmetro  $\beta$  utilizado no método de critério de óptimo definido na Secção 7.4.4 para o problema geral de optimização estrutural. Este é calculado em cada elemento da microescala, com base na sensibilidade calculada na iteração anterior (quando se calcularem os correctores para obter as matrizes constitutivas homogeneizadas), no multiplicador de Lagrange ( $\Lambda_t$ ) e nas deformações do elemento  $x$  que resulta da resolução do problema macroestrutural. Com base neste valor, o campo de densidades da microescala pode ser calculado, para a iteração  $t + 1$ , através de [Rodrigues *et al.* 1999, Bendsøe e Sigmund 2003]

$$\mu_{t+1}^{e_y} = \begin{cases} \max \left[ (1 - \zeta) \mu_t^{e_y}, \mu_{min} \right] & \text{se } \gamma^{e_y} \mu_t^{e_y} \leq \max \left[ (1 - \zeta) \mu_t^{e_y}, \mu_{min} \right] \\ \min \left[ (1 + \zeta) \mu_t^{e_y}, 1 \right] & \text{se } \gamma^{e_y} \mu_t^{e_y} \geq \min \left[ (1 + \zeta) \mu_t^{e_y}, 1 \right] \\ \gamma^{e_y} \mu_t^{e_y} & \text{se outros casos} \end{cases} . \quad (7.61)$$

Este esquema de actualização é equivalente ao método heurístico definido na equação 7.51, utilizando também um limite móvel  $\zeta$  para limitar a dimensão de cada actualização. Note-se que no ponto óptimo se tem que  $\gamma^{e_y} = 1$  para todas as densidades intermédias. Esta nova distribuição de material permite, em cada microestrutura, a obtenção da nova densidade correspondente do elemento  $e_x$  da macroescala como

$$\rho_{t+1}^{e_x} = \int_{Y_{e_x}} \mu_{t+1} dY \quad (7.62)$$

e o cálculo das novas matrizes constitutivas homogeneizadas. Já na macroescala, estas são utilizadas na resolução do problemas de equilíbrio, onde se calculam o campo de deformações e o campo de temperaturas para a próxima iteração. A densidade global actualizada é por sua vez utilizada para actualizar o multiplicador de Lagrange da condição global

$$\Lambda_{t+1} = \max \left[ 0, \Lambda_t + c \left( \int_{\Omega} \rho_t d\Omega - \bar{V} \right) \right] . \quad (7.63)$$

Esta metodologia de critério de óptimo consiste numa abordagem centrada nas densidades microestruturais, sendo as densidades macroestruturais dependentes destas. Apesar de expressar explicitamente a formulação apresentada na Secção 6.4.2 [Rodrigues *et al.* 2002], tem algumas limitações em termos de implementação. O principal problema prende-se com o facto de depender de forma bastante acentuada dos valores definidos para o parâmetro de penalidade  $c$  e o valor inicial do multiplicador de Lagrange  $\Lambda_0$  do método do lagrangiano aumentado. Para minimizar este problema, é utilizado um método de continuação na escolha do parâmetro de penalidade  $c$ , sendo o valor inicial definido pelo utilizador e posteriormente aumentado de forma gradual até um limite predefinido [Belegundu e Chandrupatla 1999]. O valor de  $\Lambda_0$  é também definido pelo utilizador.

Apesar da formulação geral ser usualmente apresentada em termos da energia potencial mínima, tal como nas equações 6.47 e 6.50, ao nível prático utiliza-se aqui como função-objectivo a formulação alternativa em que se considera a minimização da função energia de deformação elástica (*vd.* Eq. 6.57), como

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \int_{\Omega} \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x}^T \mathbf{D}^h(\mu) \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} d\Omega , \quad (7.64)$$

para o problema termoelástico. O problema térmico, por sua vez, pode escrever-se como (*vd.* Eqs. 6.69 e 6.70)

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{q}}} \int_{\Omega} \Theta d\Omega , \quad \text{com } \Theta = \langle \mathbf{T}' \rangle_{e_x}^T \mathbf{k}^h(\mu) \langle \mathbf{T}' \rangle_{e_x} . \quad (7.65)$$

Esta formulação integra directamente as contribuições dos problemas locais. Note-se que estes mantêm a sua formulação inalterada (*vd.* Eqs. 6.50 e 6.70), correspondendo à maximização local de rigidez (térmica) que, por sua vez, conduz à minimização da flexibilidade (térmica) global. Uma vantagem desta opção surge em termos de normalização. Seja por questões de gama seja por questões de ponderação em problemas multiobjectivo, permite que cada problema, quer global quer local, seja normalizado pelo respectivo valor inicial da correspondente função-objectivo. Tal é usado na metodologia de critério de óptimo apresentada anteriormente, assim como em metodologias de optimização simultânea de variáveis micro- e macroestruturais (estratégias do tipo II [Coelho 2009]). Nestes casos, cada problema (local ou global) é optimizado independentemente, com um optimizador próprio. Neste trabalho utilizam-se diversas configurações do MMA [Svanberg 1987] em ambas as escalas, assim como, alternativamente, um método do critério de óptimo para os problemas locais. O problema global é sempre optimizado com recurso ao MMA, actuando sobre as densidades globais  $\rho$ . Estas definem as restrições de volume local como  $V_Y(\mu) = \rho_{ex} \bar{V}_Y$ . Os multiplicadores de Lagrange dos respectivos problemas locais  $\lambda$ , por sua vez, de acordo com a equação 6.65, definem as sensibilidades de cada uma das parcelas locais relativamente a  $\rho$  no problema global.

Nesta abordagem de variáveis locais e globais independentes, os problemas locais são optimizados individualmente com diversas opções de algoritmo. Uma das opções é a consideração de um método de critério de óptimo. A optimização da microestrutura é feita em cada problema local, de acordo com os valores localizados a partir do respectivo elemento macroestrutural, utilizando o mesmo esquema de actualização apresentado na equação 7.51. O multiplicador de Lagrange local,  $\lambda$ , continua a ser actualizado através de um algoritmo de bissecção para respeitar a restrição de volume local  $g(\lambda) = V_Y(\mu(\lambda)) - \rho_{ex} \bar{V}_Y$  e o parâmetro  $B$ , de forma análoga a  $\gamma^{ey}$ , passa a definir-se como

$$B^{ey} = \frac{\Pi}{\lambda_t}. \quad (7.66)$$

De acordo com a equação 6.65, estes multiplicadores de Lagrange permitem ainda definir as sensibilidades das parcelas locais às variações da densidade macroestrutural, permitindo assim controlar o problema de optimização global e a actualização destas variáveis. Outras alternativas surgem com diferentes configurações do MMA. Por um lado, pode ser utilizada a configuração base do método. Por outro lado, o controlo das assíntotas e dos limites móveis permite manipular as propriedades de convergência dos problemas locais (e global), equilibrando o comportamento das duas escalas. No limite, a fixação das assíntotas pode dar origem a métodos como o CONLIN [Fleury 1989, Coelho *et al.* 2008a]. A utilização do MMA (e casos específicos deste) na resolução dos problemas locais tem a vantagem de permitir a consideração de forma mais eficiente de constrangimentos locais adicionais, como, por exemplo, restrições de perímetro. O CONLIN, em particular, tende a gerar multiplicadores de Lagrange locais,  $\lambda$ , mais correctos, permitindo um cálculo de sensibilidades mais preciso e assim um melhor controlo de convergência [Coelho *et al.* 2008a]. Note-se que esta definição dos multiplicadores de Lagrange locais é essencial para o controlo do problema global. Se todas as densidades de um problema local têm valores extremos, o multiplicador de Lagrange da restrição local deixa de estar definido. Atendendo ao facto de se pretenderem soluções definidas nas microestruturas, este cenário tende a ocorrer. Por um lado, a utilização de filtros na microescala evita este caso-limite. Por outro lado, apesar de a probabilidade de ocorrência para soluções sem filtro ser elevada, o problema converge ainda assim para uma solução válida. Note-se que os casos-limite acontecem, independentemente da existência de filtros, nos extremos onde as densidades globais sejam os valores-limite, significando microestruturas totalmente preenchidas para  $\rho_{ex} = 1$  ou totalmente vazias para  $\rho_{ex} = 0$ . Neste sentido, tirando partido de metodologias onde o problema macroestrutural possa ser resolvido de forma independente, é possível contornar este limite restringindo as densidades globais a valores intermédios e obrigando, assim, a que todas as estruturas sejam constituídas por duas fases. Utilizando o MMA no processamento da macroescala, basta definir os limites das densidades de acordo com o pretendido ( $\rho_{min} \leq \rho \leq \rho_{max}$ ). Salienta-se

ainda o facto de as metodologias com manipulação simultânea de densidades macro- e microestruturais requererem um controlo mais preciso sobre a forma como as variáveis são actualizadas. Para controlar a estabilidade do processo iterativo, é usualmente necessário abrandar a actualização das densidades macroestruturais e agilizar a actualização das variáveis microestruturais. Em métodos derivados do MMA isto pode ser feito manipulando o parâmetro ALBEFA (*vd.* Eqs. 7.52 e 7.53), enquanto que em critérios de óptimo se pode manipular para o efeito o parâmetro  $\zeta$ .

Uma outra alternativa de resolução surge ainda quando se consideram as variáveis microestruturais como parte integrante de um problema global único. Neste caso, as variáveis macroestruturais são mais uma vez dependentes das microestruturas, mas estas, em vez de serem processadas isoladamente na respectiva microescala, são optimizadas em simultâneo num problema de optimização de grandes dimensões. Neste caso, pode deixar de se utilizar uma formulação que mantém os problemas separados e a optimização pode feita em termos de minimização de energia de deformação elástica com a função-objectivo

$$\min_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \int_{\Omega} \left[ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x}^T \mathbf{D}^h(\mu) \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \right] d\Omega, \quad (7.67)$$

para o problema de termoelasticidade. No caso do problema térmico, a abordagem é idêntica, com

$$\min_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = V \\ \mathbf{K}_T \mathbf{T} = \mathbf{q}}} \int_{\Omega} \left[ \langle \mathbf{T}' \rangle_{e_x}^T \mathbf{k}^h(\mu) \langle \mathbf{T}' \rangle_{e_x} \right] d\Omega. \quad (7.68)$$

Este problema pode ser resolvido recorrendo ao método das assíptotas móveis, mais indicado do que os métodos de critério de óptimo para problemas com um elevado número de variáveis ( $N_{e_x} \times N_{e_y}$ ). A avaliação constitutiva e de sensibilidade é aqui efectuada para cada problema local, sendo posteriormente as sensibilidades processadas de modo a conduzir, em simultâneo, à actualização de todo o universo de densidades microestruturais. Salienta-se o facto de esta abordagem ter sido também testada com os métodos de critério de óptimo aqui apresentados. No entanto, apesar de se obter convergência para soluções adequadas, estes métodos revelam-se muito ineficientes devido ao elevado número de variáveis, razão pela qual não são utilizados.

Note-se que as metodologias apresentadas são igualmente válidas para as restantes estratégias (H2 e H4 a H8). Na homogeneização inversa, aplicada isoladamente na metodologia H2 (*vd.* Eq. 6.76) ou num processo multiescala com avaliação constitutiva nas metodologias H4 e H5 (*vd.* Eq. 6.79), a optimização concentra-se na microescala. Utilizando MMA ou métodos de critério de óptimo, existe apenas uma CRU cuja distribuição de material é actualizada em cada iteração do problema. No caso da metodologia H6 (*vd.* Eqs. 6.80 e 6.81), com uma abordagem desacoplada das duas escalas, é possível utilizar qualquer uma das combinações apresentadas. Neste caso, é conveniente limitar os intervalos de actualização das densidades de ambas as escalas para evitar que seja um dos problemas (global ou local) a dominar o processo de convergência. Este é ainda o único caso onde se utilizam técnicas de filtragem em ambas as escalas. Finalmente, as metodologias H7 e H8 diferem das anteriores pelo facto de constituírem abordagens intermédias. Nestes casos, a avaliação do objectivo continua a ser idêntica mas o número de problemas locais não é correspondente ao número de elementos macroestruturais nem necessariamente único. Nestes modos de funcionamento é feita uma divisão da macroescala em regiões e existe um problema local por cada um dos subdomínios. A metodologia H7 difere da metodologia H8 pelo facto de permitir a variação da densidade macroestrutural. Neste caso, mantendo o esquema de actualização simultânea das variáveis de densidade macro- e microestrutural, à semelhança da estratégia H3, é calculada a densidade local óptima de cada uma das regiões macroestruturais. No caso H8, à semelhança da estratégia H5, a densidade macroestrutural é constante em todo o domínio, fazendo

com que a restrição de volume em cada um dos problemas locais seja igual à restrição de volume global.

Note-se ainda que a actualização de variáveis locais da homogeneização inversa (H2) e estratégias multiescala alternativas (H4 a H8) continua a ser controlada pelas sensibilidades locais (*vd.* Eqs. 7.55, 7.58 e 7.59). Nestes casos, no entanto, estas não são calculadas de acordo com a localização nos elementos finitos macroestruturais correspondentes a cada um dos problemas locais. As sensibilidades são aqui calculadas com base em valores prescritos, no caso da homogeneização inversa, ou de acordo com médias ponderadas dos campos macroestruturais obtidos em cada domínio macroestrutural considerado. Tomando como exemplo o problema de elasticidade, sem carregamentos múltiplos, esta ponderação resulta num cálculo de sensibilidades locais relativamente à variação das densidades microestruturais,  $\mu$ , para cada elemento finito local, que se pode escrever como

$$\Pi = \sum_{e=1}^N \left\{ \iota \frac{V_{e_x}}{V_{\Omega}} \left[ \frac{\partial \langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle_{\Omega'}}{\partial \mu(y)} \langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \langle \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \right] \right\}. \quad (7.69)$$

$\langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle$  corresponde à matriz constitutiva correspondente à topologia local óptima calculada, única para o domínio considerado, e  $\langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x}$  à média das deformações globais no elemento finito macroestrutural  $e_x$ . O número de parcelas consideradas corresponde ao número de elementos existentes no domínio considerado  $\Omega'$ . Assim, este corresponde a toda a macroescala nos casos H4 a H6 ( $\Omega' = \Omega$ ), sendo  $N = N_{e_x}$ . Nos casos H7 e H8, por sua vez, cada um dos problemas locais considera apenas os elementos macroestruturais existentes no correspondente subdomínio  $\Omega'$ , sendo  $N = N_{e_x \in \Omega'}$ . Por sua vez,  $\iota$  é um parâmetro de ponderação a ser utilizado para controlar a forma como a média das sensibilidades é calculada (*vd.* Apêndice B). Assim,  $\iota = 1$  corresponde a média volúmica no domínio considerado. Contudo, pode também ser usado para ponderar grandezas alternativas como, por exemplo, tensões equivalentes, tensões principais ou densidades macroestruturais (H6).

### 7.5.3 Abordagem Local

A abordagem local de optimização topológica é alternativa à homogeneização inversa. O objectivo é comum, pretendendo-se obter a microestrutura ideal para responder a um objectivo de rigidez e/ou condutividade térmica. Neste caso, no entanto, os algoritmos e a estrutura de optimização utilizados são idênticos ao problema geral de optimização (*cf.* Sec. 7.4), inclusive em termos de função-objectivo e metodologias de optimização. As principais diferenças podem ver-se na figura 7.15. Por um lado, note-se que o problema global passa a utilizar a geometria e malha da célula representativa unitária habitualmente destinada aos problemas locais. Por outro lado, o problema passa por fases de pré- e pós-processamento internos diferentes. Assim, a solução inicial é calculada de modo a evitar desrespeitar a restrição de volume, por um lado, e, por outro lado, gerada de modo a evitar questões de campo uniforme de sensibilidades que tendem a impedir o correcto funcionamento do procedimento de optimização. Outra operação essencial a este nível é a configuração das condições de fronteira. Ao contrário do problema global, onde estas são definidas pelo utilizador de acordo com condições de fronteira naturais ou essenciais a impor, neste caso o utilizador define apenas o campo médio de tensões ou deformações ao qual a CRU estaria sujeita. De acordo com o campo em causa e com a geometria da CRU, o programa calcula as condições de fronteira MFC necessárias para gerar uma solicitação equivalente sobre a CRU. Isto é feito de acordo com o descrito na Secção 7.2.2, originando um conjunto de condições MFC homogêneas ou heterogêneas.

Por sua vez, o procedimento geral de optimização topológica (termomecânico, térmico ou multiobjectivo) é em tudo idêntico ao caso geral. Depois de terminado o processo iterativo, surge contudo o processo de homogeneização como tarefa de pós-processamento. Esta actua também sobre a malha do problema global e permite calcular as propriedades equivalentes da distribuição de material obtida como óptimo para a solicitação em causa.

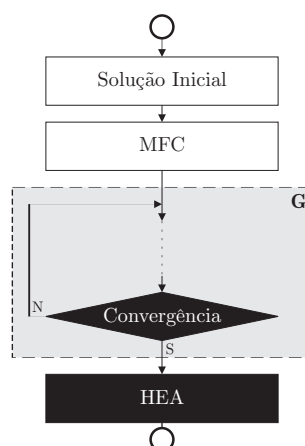


Figura 7.15: Representação esquemática das diferenças do algoritmo de abordagem local relativamente à estrutural macroestrutural de otimização topológica.

## 7.6 Pré- e Pós-Processamento

Neste trabalho, recorrendo a interfaces configuradas especificamente para o efeito, quer o pré-processamento quer o pós-processamento são feitos utilizando o programa GiD. Este programa permite a geração de malha com diversos tipos de elementos, de controlo de malha (estruturada ou não) e de vários protocolos de importação de geometrias externas, e fornece ao utilizador amplas possibilidades configuração. Todas as configurações e opções de personalização podem ser definidas num chamado problema-tipo, tornando o GiD uma interface específica do programa e automatizando a geração de dados compatíveis. No sentido do pós-processamento, basta gerar ficheiros de resultados com formatos suportados pelo GiD. Este programa fornece uma grande variedade de representações de resultados, análises de variações, configurações gráficas, *etc.*

No programa mainFRAN, as interações com o GiD fazem-se a diversos níveis. Por um lado, existem usualmente dois problemas em simultâneo, um estrutural e outro local. Os dados do problema global incluem toda a informação geométrica, de material e condições de fronteira. O problema local, por sua vez, precisa apenas da malha de elementos finitos, já que todo o problema, incluindo as condições de fronteira, é gerido pelo próprio mainFRAN. Ao nível do pós-processamento, esta divisão segundo escalas mantém-se. Neste caso, no entanto, a diversidade de ficheiros e tipos de resultados pode ser substancialmente maior, dependendo do tipo de problema e do número de subproblemas em resolução.

## 7.7 Cálculo Paralelo

A abordagem numérica dos procedimentos apresentados ao longo deste capítulo é condicionada por diversos factores. Por um lado, esta depende directamente do tipo de problema e das restrições associadas. Por outro lado, é moldada por especificidades de programação e algoritmia. Estas dependências estão intimamente ligadas às opções tomadas ao nível da programação paralela, quer em termos de infra-estrutura computacional quer em termos de opções de programação. Note-se ainda que uma parte integrante de aplicações de elementos finitos em cálculo paralelo é o esquema de partição de domínio utilizado (*vd.* Sec. 3.2.3). Neste trabalho a decomposição de domínios é feita utilizando a livreria METIS [Karypis e Kumar 1998].

Resumem-se em seguida algumas questões associadas à versão paralela do programa aqui descrito. Para o efeito, começa-se por abordar questões gerais, seguindo depois para especificidades



dos problemas de optimização e dos múltiplos problemas da abordagem hierárquica.

### 7.7.1 Problemas Gerais do MEF

Começando por problemas gerais de elementos finitos, a paralelização é feita a diversos níveis. O sistema de equações é construído localmente, isto é, em cada nó computacional é construída apenas a parte do sistema de equações respeitante a cada subdomínio. Apesar de ser possível construir todo o sistema no nó mestre e fazer a posterior comunicação aos nós responsáveis por cada um dos subdomínios, a opção implementada é significativamente mais eficiente [Kim e Im 2003]. Na realidade, para além de se reduzir a quantidade de memória computacional exigida, esperam-se, nesta etapa, eficiências próximas de 1. Este processo é perfeitamente expansível pelo facto de quer a formulação elementar quer a maior parte da assemblagem poderem ser realizadas sem necessidade de comunicação entre os diferentes processos. A gestão das condições de fronteira também é realizada localmente. Uma das características do método do gradiente conjugado é o facto de não ser essencial assemblar globalmente a matriz de coeficientes, sendo apenas necessários os resultados das multiplicações de matrizes por vectores e dos produtos internos envolvidos no método. É por esta razão que os subdomínios podem ser tratados independentemente em cada um dos processos. Neste sentido, a única troca de informação entre diferentes processos, no que diz respeito à definição do sistema, consiste em completar as partes do sistema relativas a graus de liberdade das fronteiras dos domínios. Assim, cada processo precisa de assemblar, também, a influência da rigidez dos elementos pertencentes aos outros subdomínios com conectividade em nós de fronteiras comuns. Esta operação é feita apenas no início da fase de resolução. Em termos de processamento paralelo, em cada iteração existem apenas dois tipos de operações relevantes, os produtos internos e as multiplicações de matrizes por vectores [Kim e Im 2003]. No entanto, em cada processo, estas operações são executadas de forma independente sobre o subdomínio respectivo. Na realidade, o método do CG paralelizado tem um funcionamento idêntico ao da versão em série, sendo apenas necessário influenciar os diferentes subdomínios com a mesma direcção de busca para garantir que as varias partes do sistema reajam como se fossem processadas pelo mesmo processador. Assim, as actualizações dos vectores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{r}$  são realizadas em cada processador (*vd.* Eqs. 7.24 e 7.25). Em cada iteração, a convergência do processo é influenciada pelos coeficientes globais  $\alpha$  e  $\beta$ , calculados pelos produtos internos envolvendo os vectores de resíduo e as direcções de busca. Em rigor, estes constituem os dois pontos de sincronização dos processos paralelos, sendo os que requerem comunicações colectivas. Contudo, estas comunicações envolvem apenas os escalares provenientes dos produtos internos realizados em cada processador, sendo somados em todos os processadores. Em cada iteração é ainda necessário resolver o produto  $\mathbf{A}\mathbf{p}$ , que, mais uma vez, apresenta a vantagem de não necessitar do armazenamento explícito da matriz global, apenas da obtenção da parte do resultado respeitante a cada processador.

### 7.7.2 Optimização Topológica

A tarefa mais exigente de um problema de optimização topológica é tipicamente a resolução do sistema de equações associada à análise do problema [Borrvall e Petersson 2001, Amir e Sigmund 2010, Bendsøe e Sigmund 2003]. Esta tarefa é feita múltiplas vezes ao longo do processo iterativo, assim como as tarefas associadas à sua definição. No entanto, a estrutura geral deste procedimento é idêntica ao abordado na secção anterior, com a definição do sistema de equações, configuração de condições de fronteira e posterior resolução. Neste aspecto, os pressupostos apresentados para a versão paralela são aqui válidos também. Assim, o cálculo macroestrutural paralelo de problemas de optimização começa por ter uma configuração de processamento distribuído na definição das equações elementares e na assemblagem local. Note-se, contudo, que o facto de as equações locais serem armazenadas em memória para serem apenas afectadas das variações de densidade do material em cada iteração traz grandes benefícios em termos de processamento, mas levam a que o peso da sua paralelização se faça sentir de forma menos pronunciada após a primeira itera-



ção. O sistema de equações, por sua vez, é em cada iteração resolvido com recurso ao método do CG anteriormente referido. É assim possível obter bons resultados de desempenho paralelo com a paralelização da fase de análise de um problema de optimização topológica, pelo que se optou por não paralelizar os algoritmos de optimização utilizados. Verifica-se, no entanto, que em alguns problemas há uma tarefa cujo peso tem um crescimento geométrico com a dimensão do problema. A avaliação inicial da malha para a definição de vizinhanças e distâncias entre elementos finitos em problemas com filtros torna-se muito onerosa com o aumento das dimensões dos problemas. No entanto, a sua simplicidade torna-a também propensa a uma simples paralelização. Como esta avaliação pode ser efectuada de modo completamente independente, elemento a elemento, torna-se perfeitamente escalável e resulta em ganhos assinaláveis.

### 7.7.3 Optimização Topológica Multiescala

É conveniente referir, antes de mais, que as considerações efectuadas relativamente às versões paralelas definidas anteriormente continuam a ser válidas quando se tratam de problemas de optimização topológica multiescala. Note-se também que esta secção se centra na estrutura hierárquica, sendo os restantes problemas, nomeadamente os problemas de optimização estrutural com microescala predefinida, regidos pelos pressupostos anteriores. Em qualquer caso, a parte macroestrutural dos problemas em análise assenta na mesma estrutura computacional, pelo que se mantém o seu funcionamento paralelo. A principal diferença prende-se com a definição das equações elementares, visto que numa estrutura hierárquica as propriedades constitutivas se alteram em cada iteração e obrigam à construção completa de cada sistema de equações.

A estrutura de cálculo para problemas de optimização topológica hierárquica rege-se, em termos de cálculo paralelo, pela gestão dos problemas locais. Para além de constituírem, por larga margem, o principal requisito computacional destes problemas, acarretam alguns desafios particulares. São necessários dois modelos de elementos finitos, um correspondente à discretização da estrutura (macroescala –  $\Omega$ ) e outro à discretização do domínio onde se desenvolve a optimização de cada uma das distribuições de material associadas (microescala –  $Y$ ). A estrutura hierárquica do problema leva a que seja necessário resolver um problema de homogeneização, acarretando várias resoluções de sistemas de equações por cada ponto de integração de cada elemento da macroescala, assim como o próprio problema de elementos finitos global. Mesmo utilizando uma aproximação comum, como o caso neste trabalho, em que se usa o campo médio de deformação em cada elementos da macroescala para permitir a resolução de um problema de optimização local por elemento macroestrutural, a dimensão do problema pode assumir proporções bastante limitativas. Considere-se como exemplo um problema bidimensional, com uma malha regular de  $20 \times 40$  elementos quadriláteros (1722 Graus de Liberdade – GL) na macroescala e malhas regulares de  $20 \times 20$  elementos quadriláteros (882 GL) na microescala. Apesar da aparente pequena dimensão, o problema global de 1722 GL será acompanhado da resolução de 800 problemas de homogeneização em cada iteração. Cada um destes problemas acarreta a resolução de 3 sistemas de equações para o caso de elasticidade, 4 no caso de termoelasticidade e 6 no caso de se resolver também o problema térmico. Se o problema for tridimensional, o número de sistemas a resolver passa para 6, 7 e 10, respectivamente, para além das maiores dimensões dos sistemas associados. Adicionalmente, estes problemas tendem a sofrer de problemas sérios de condicionamento, especialmente no caso de serem utilizados métodos de penalidade para impor as condições de periodicidade, agravados pelas diferenças de magnitude dos valores de rigidez local com a utilização do SIMP. Tudo isto pode ser relacionado com uma medida da qualidade do condicionamento de um sistema de equações através o número de condição espectral. A penalização de propriedades característica do SIMP, especialmente em problemas de material e vazio, tende a aumentar este valor, traduzindo uma deterioração do condicionamento das matrizes que definem os sistemas de equações. Uma matriz mal-condicionada resulta numa maior sensibilidade da solução do sistema a pequenas variações dos coeficientes da matriz ou do vector de coeficientes independentes, criando problemas de convergência nos algoritmos de resolução (*vd.* Sec. 7.2.4.1) [Borrvall e Petersson 2001, Kaw e Kalu 2011]. A utilização simultânea de penalidades nas

condições MFC e penalidades do modelo SIMP em problemas de homogeneização com otimização topológica criam ainda mais problemas de condicionamento. Apesar de estes problemas serem reduzidos com recurso a técnicas de preconditionamento, esta questão pode tornar-se ainda mais limitativa se o método de resolução for paralelizado. Note-se que a decomposição de domínio resulta numa divisão do sistema de equações usualmente feita de duas formas alternativas, por nós (ou por graus de liberdade) ou por elementos, como é ilustrado na figura 7.16 para elementos de dois nós. O método aqui utilizado segue a segunda opção [Pinho-da-Cruz 2007], mais adequada para a resolução de problemas de elementos finitos por não fazer a divisão de equações elementares. Em qualquer dos casos, a comunicação entre domínios é feita com informação relativa às fronteiras. Como a periodicidade impõe a existência de elementos virtuais com conectividade entre nós usualmente pertencentes a domínios diferentes, para além das questões de condicionamento, pode surgir uma tendência inicial para que as penalidades se tornem dominantes nos respectivos domínios, levando a erros mais pronunciados nas soluções iniciais e à consequente deterioração da qualidade da convergência, já que é a comunicação entre processos que gradualmente regula a coerência das soluções.

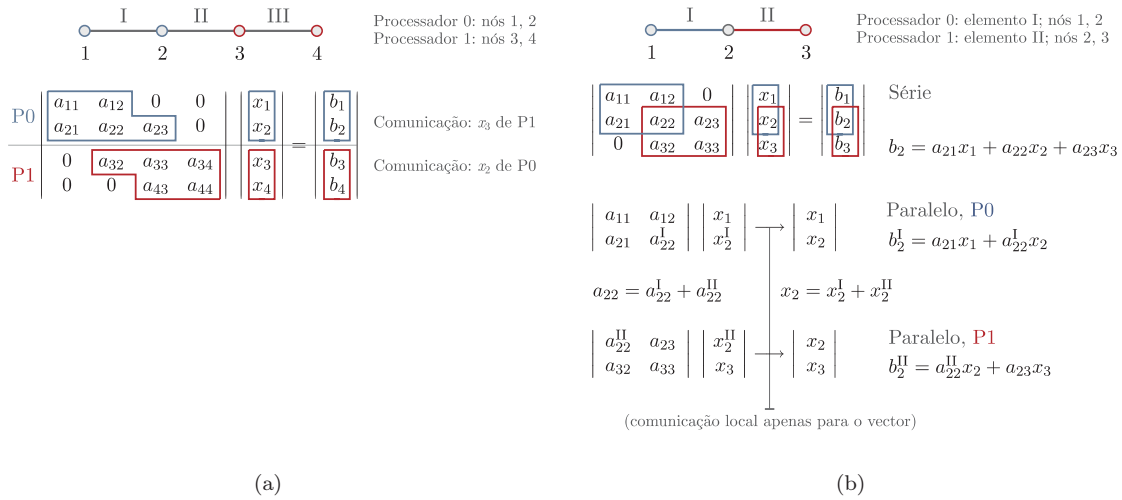


Figura 7.16: Ilustração dos sistemas de equações resultantes da decomposição de domínio (a) por nós e (b) por elementos.

Neste trabalho, foram três as estratégias de paralelização adoptadas para a resolução dos problemas locais. Estas são ilustradas na figura 7.17 e resumem-se de seguida. Apesar das referidas limitações, uma das abordagens adoptadas consiste em resolver cada sistema de equações em paralelo, recorrendo a métodos de decomposição de domínio. Neste caso, cada um dos problemas locais é resolvido em sequência e em todos os processadores (Fig. 7.17(a)), com uma estrutura paralela interna de resolução dos problemas de elementos finitos em tudo idêntica à versão paralela do problema macroestrutural. Alternativamente, pode tirar-se partido da estrutura hierárquica e da separação dos problemas locais para distribuir cada um deles em diferentes nós de processamento. Assim, cada sistema é resolvido em série, mas no nó de computação correspondente ao elemento macroestrutural respectivo, dando origem a uma estrutura de cálculo distribuído. Esta abordagem traz evidentes vantagens em termos de eficiência, sendo estes problemas resolvidos em simultâneo com outros problemas locais. Esta estratégia, apesar de representar um grão computacional potencialmente diferente para cada processador, tem as vantagens de, sendo uma estratégia de processamento distribuído, tender a ser mais escalável e menos sensível a problemas de condicionamento do sistema associado. Mesmo no caso de utilização de metodologias de otimização que

percam a independência dos problemas locais – como o modo H1 com MMA –, esta estratégia traz claras vantagens pelo facto de continuar a permitir que os problemas de homogeneização associados a cada problema local, responsáveis pela maior parte dos recursos consumidos, continuem a ser executados deste modo. Distinguem-se assim duas estruturas alternativas. Por um lado, em modos de cálculo que mantenham a separação total dos problemas locais, os problemas são totalmente distribuídos, tanto em termos de homogeneização quanto em termos de procedimentos locais de optimização (Fig. 7.17(b)). Alternativamente, modos de cálculo em que as variáveis microestruturais sejam optimizadas em simultâneo, separou-se a optimização, não-paralelizada, da fase de cálculo de homogeneização e determinação das sensibilidades constitutivas locais, distribuída de modo a manter o desempenho paralelo pretendido (7.17(c)). Salienta-se o facto de ter sido necessário adaptar, nesta versão distribuída, a estrutura do método de resolução de sistemas de equações aqui utilizado. A versão paralela utilizada recorria sempre ao universo de processadores disponíveis, fornecido pela livraria MPI através do comunicador `MPI_COMM_WORLD`. Foram necessárias algumas alterações para permitir que este fosse executado apenas no respectivo processador local, de modo a correr em série considerando cada um dos processadores como nó mestre do processo em causa. Note-se ainda que a estrutura distribuída implementada tem algumas limitações. Por um lado, o seu desempenho depende do resto da divisão inteira de processos pelo número de processadores. Por outro lado, as comunicações podem tornar-se num peso bastante elevado nesta abordagem. Como a quantidade de dados envolvidos pode ser maciça, a forma como estes são geridos e comunicados entre processadores pode constituir um sério *bottleneck*<sup>9</sup> ao desempenho computacional, especialmente em situações de pequeno grão computacional. Dependendo da estratégia de optimização utilizada, os requisitos de memória na resolução de alguns problemas podem ser bastante elevados. Este facto é notório não só em termos de armazenamento geral mas também ao nível de variáveis isoladas, levando mesmo à necessidade de se anular os limites de alocação de processos (`ULIMIT -S UNLIMITED`) no sistema operativo Linux. Neste trabalho, algumas concessões foram feitas a este nível devido à flexibilidade pretendida em termos de modularidade, e à necessidade de controlar uma elevada quantidade de resultados e valores intermédios, com sucessivas escritas e operações de pós-processamento.

## 7.8 Considerações Gerais

Nesta secção salientam-se algumas questões gerais de implementação, relevantes para diversos aspectos abordados anteriormente.

Os critérios de convergência são definidos consoante o problema em análise. Estes são definidos com base na variação da função-objectivo e/ou das variáveis de optimização. Note-se que os critérios baseados na evolução das variáveis são usualmente mais fiáveis, já que em diversos casos a função-objectivo estabiliza muito antes da distribuição de material. Este efeito é particularmente notório em problemas de optimização hierárquica, onde a aparente estabilização (ou oscilação em torno de valores médios) da função-objectivo envolve muitas vezes reorganizações ainda evidentes de material ao nível local. Neste sentido, válido tanto em problemas da macroescala quanto em problemas multiescala, é comum adoptar como critério a paragem do algoritmo quando nenhum valor de densidade varia mais do que um valor prescrito ao longo de duas (ou mais) iterações. Note-se que este critério acarreta alguma dependência dos parâmetros utilizados na definição do problema. A título de exemplo, alguns problemas tendem a gerar efeitos parasita de flutuação de densidade para regiões de densidade baixa (*e.g.* [Gao e Zhang 2010]) que, apesar de não alterarem a topologia resultante, evitam a convergência do problema com este tipo de avaliação.

Utilizam-se aqui estratégias de continuação (*continuation methods*) em diversas aplicações. No SIMP, por exemplo, esta utilização é por vezes aconselhada para evitar a convergência para míni-

---

<sup>9</sup> *Bottleneck* é uma expressão de origem inglesa que designa usualmente um fenómeno onde o desempenho de um determinado sistema é limitado por um factor isolado ou por um número reduzido de factores. Advém literalmente da limitação de fluxo imposta pelo diâmetro da saída numa garrafa.

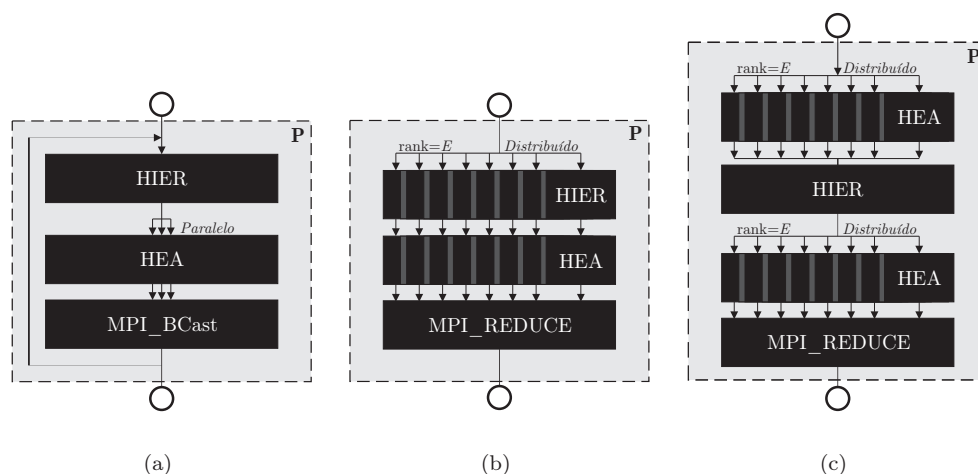


Figura 7.17: Ilustração dos modos de cálculo paralelo/distribuído na resolução local de problemas de optimização hierárquica: (a) resolução em paralelo e resolução distribuída segundo os modos (b) H3 e (c) H1.

mos locais [Bendsøe e Sigmund 1999]. Actuando sobre a penalização das sensibilidades, altera-se gradualmente o problema suavizado e convexo para que se vá aproximando do problema discreto original, apesar de o tornar não-convexo [Sigmund e Petersson 1998]. Isto é feito por etapas, alterando o processo iterativo de modo a que seja retomado após convergir, mas com uma penalização mais acentuada. Note-se, no entanto, que as trajectórias dos processos de optimização utilizando estes métodos podem ser descontínuas [Stolpe e Svanberg 2001b]. Uma aplicação semelhante pode ser feita na utilização de técnicas de filtragem, iniciando-se o processo com raios elevados para obter problemas convexos e independência de malha, e posteriormente reduzi-los para aproximar a solução discreta [Sigmund e Torquato 1997]. Na aplicação do método do lagrangiano aumentado, a penalidade pode também ser gradualmente aumentada, evitando problemas de condicionamento e instabilidade no início do processo, e garantindo a convexidade necessária para a convergência no final [Belegundu e Chandrupatla 1999]. Segundo esta filosofia, existem ainda outras opções que por vezes são tomadas no sentido da estabilização da convergência (*e.g.* na selecção dos limites de actualização as variáveis de optimização). Por um lado, opta-se por diferentes limites em diferentes situações, relaxando ou apertando as actualizações das densidades de acordo com o problema. Por outro lado, especialmente em problemas que tendam a originar oscilações em torno de densidades baixas, é comum neste trabalho apertar os limites de actualização quando de detectam estas instabilidades.

Note-se que o custo do processamento de um problema computacional de optimização é regulado pela complexidade de três aspectos principais: (i) o modelo, (ii) a análise e (iii) a optimização [Venkataraman e Haftka 2004]. Estas complexidades promovem a procura de metodologias que reduzam requisitos computacionais sem prejuízo das soluções obtidas. O cálculo paralelo é uma das abordagens possíveis, actuando não sobre a redução do custo computacional, mas sobre o aumento dos meios efectivamente utilizados para obter a solução pretendida. Note-se, no entanto, que existem caminhos alternativos a seguir. Salienta-se aqui um grupo particular, pela sua simplicidade e qualidade de resultados. Este concentra-se na redução do peso computacional daquela que é a parte mais onerosa de um problema deste tipo, as sucessivas resoluções de sistemas de equações [Bendsøe e Sigmund 2003, Amir e Sigmund 2010]. Diversos trabalhos mostram que resultados aproximados dos sistemas de equações utilizados nas etapas de análise podem conduzir à mesma solução final do problema de optimização, sendo que análises aproximadas podem conduzir

a sensibilidades correctas [Amir e Sigmund 2010]. Surgem aqui diferentes abordagens, seja por esquemas de reanálise aproximada, alteração das metodologias de resolução dos sistemas de equações ou simplesmente o recurso a critérios de paragem mais relaxados em métodos de resolução iterativos [Kirsch *et al.* 2002, Wang *et al.* 2007, Amir *et al.* 2009, Amir e Sigmund 2010, Amir *et al.* 2010]. Esta abordagem é também testada neste trabalho, manipulando a tolerância de convergência e a penalidade do algoritmo de resolução iterativo utilizado.

Refira-se que um trabalho deste tipo é um processo evolutivo, onde o código implementado vai constantemente sofrendo mutações. Seja pela necessidade de resolver um determinado problema, seja pela curiosidade de testar uma diferente aplicação, tenta-se aqui desenvolver um produto vivo que espera constituir uma base aberta para novos trabalhos e diferentes ideias.

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Capítulo 8

# *Cluster* Beowulf TaranTux — Montagem e Configuração de um Sistema de Computação Paralela

*Descrevem-se os principais aspectos de relevo na montagem de um sistema de computação paralela utilizando componentes comuns. Resume-se a configuração do cluster TaranTux.*

---

Pretende-se neste capítulo abordar os requisitos essenciais de um sistema de computação paralela de multicomputadores do tipo *cluster*<sup>1</sup> Beowulf<sup>2</sup>. Neste sentido, faz-se a classificação geral deste tipo de sistema, e abordam-se as configurações habituais e opções em termos de *hardware* mais comuns em plataformas de pequena e média dimensão (classificação assumida por questões de conveniência e nível de investimento). Faz-se ainda uma descrição detalhada do sistema montado e configurado no início deste trabalho, tanto ao nível do *hardware* quanto ao nível do *software*. Pretende-se assim que este capítulo possa constituir um guia introdutório de configuração não só para o sistema actual mas também para outros sistemas semelhantes. Os elementos descritos ao longo deste capítulo foram compilados durante a montagem e a configuração do *cluster* Beowulf TaranTux. Baseiam-se em diversas fontes, tanto referências bibliográficas quanto referências de discussão geral, nomeadamente obtidas na internet [Radajewski e Eadline 1998, Parhami 1999, Spector 2000, Gropp *et al.* 2003, Brown 2003, Pitanga 2004, Davies *et al.* 2006].

### 8.1 Enquadramento

O tipo de arquitectura abordado tem vindo a proliferar desde o início da década de 90. Efectivamente, tem vindo a verificar-se uma tendência gradual de migração de arquitecturas dedicadas, geralmente mais dispendiosas (quer em termos de *hardware* quer ao nível do *software*), como é o

---

<sup>1</sup>Utilizando o termo anglo-saxónico, um *cluster* é um *aglomerado* de computadores independentes, utilizados em conjunto de modo a constituir um sistema de computação paralela, recorrendo a *software* específico e uma rede dedicada.

<sup>2</sup>O nome Beowulf é inspirado num antigo poema anglo-saxónico. Foi escolhido por Thomas Sterling, um dos criadores do *cluster* Beowulf. Beowulf é o herói da história, retratado como possuindo a força de muitos homens.

caso dos tradicionais supercomputadores, para soluções de custo mais reduzido e maior flexibilidade. Este fenómeno deve-se a um conjunto de factores, dos quais se destacam os seguintes: o desempenho de *workstations* e computadores pessoais evolui de forma acentuada, especialmente a partir do momento em que surgem tecnologias de *multithreading* e núcleos múltiplos; a evolução das redes permite aumentar a largura de banda e reduzir a latência, compensando uma das habituais limitações de sistemas de memória distribuída; a facilidade de integração em sistemas e redes existentes; a crescente variedade de ferramentas, muitas vezes gratuitas, de desenvolvimento, gestão e avaliação de desempenho; um custo mais reduzido que o dos habituais sistemas dedicados de computação paralela, apresentando ainda um elevado potencial de escalabilidade; a possibilidade de integrar nós com diferentes características, em alguns casos mesmo máquinas obsoletas. Uma das maiores limitações é ainda a rede de comunicações, pelo menos com redes de utilização corrente, tornando este tipo de arquitectura por vezes pouco indicada para aplicações com um grande peso da componente de comunicação.

Existem diversas definições de *cluster* do tipo Beowulf. Enquanto algumas usam como referência a arquitectura usada no conceito original [Sterling *et al.* 1995], existem casos em que se generaliza a designação para uma grande diversidade de sistemas de computação paralela com memória distribuída. A designação utilizada neste texto, constituindo talvez a mais consensual, caracteriza um *cluster* Beowulf como sendo um sistema de arquitectura MIMD (*vd.* Sec. 3.2.2) do tipo multicomputador de computação paralela. Este sistema consiste normalmente num nó classificado como servidor ou mestre (*master*), e um ou mais nós clientes, tais como nós escravos (*slaves*), ligados por uma rede LAN (*Local Area Network*) ou SAN (*System Area Network*). Esta configuração é ilustrada esquematicamente na Figura 8.1. Mais ainda, um *cluster* Beowulf é especificamente um sistema constituído por computadores pessoais (*Personal Computer* – PC) cujos componentes são *off-the-shelf*, *i.e.* componentes convencionais e genéricos, característicos de qualquer máquina de utilização pessoal. Estes computadores devem ser capazes de suportar sistemas operativos (*Operating System* – OS) *open-source*, essencialmente alguma distribuição de Linux, protocolos livres de passagem de mensagens (*Parallel Virtual Machine* – PVM – e/ou *Message Passing Interface* – MPI), e usar como componentes periféricos adaptadores de rede padrão Ethernet e *switches*. Estas máquinas não contêm *hardware* específico para computação paralela e são facilmente reproduzíveis. O nó servidor controla todo o sistema, e fornece fluxos de dados e instruções aos outros nós. É ainda através deste que se faz a interface com o utilizador e a rede exterior ao *cluster*. Refira-se que, em sistemas de maiores dimensões, é comum existirem diversos servidores, assim como nós dedicados a tarefas específicas (*e.g.* gestão de consolas ou estações de monitorização). É também comum os nós clientes serem dependentes do servidor. Nestes casos, os nós clientes são configurados e controlados inteiramente pelo servidor, fazendo apenas as tarefas que partem deste. Em configurações sem disco, os nós clientes não têm sequer conhecimento do seu nome ou endereço IP (*Internet Protocol*) até que estes lhes sejam fornecidos pelo servidor. Nestes casos, mesmo a base de OS necessária para suportar os procedimentos é fornecida no arranque pelo servidor (RAM *disks*<sup>3</sup>). Uma das maiores diferenças entre um *cluster* Beowulf e um COW (*Cluster Of Workstations*) é o facto de o primeiro se comportar como se de uma única máquina se tratasse e não como um conjunto de máquinas ligadas em rede. Na maioria dos casos, os nós cliente não têm periféricos e podem ser acedidos apenas via *login* remoto a partir do nó servidor ou do exterior através deste. Na sua forma mais simples (e económica), os nós de um Beowulf podem ser vistos como CPU (*Central Processing Unit*) com memória que podem ser simplesmente ligados ao *cluster* via rede, tal como um processador ou módulo de memória pode ser montado numa *motherboard*. Assim, um *cluster* Beowulf resume-se à tecnologia que permite ligar computador pessoais com Linux para formar uma máquina de processamento paralelo. Na realidade, apesar de existirem muitas ferramentas e pacotes de *software* desenvolvidos para tornar estas arquitecturas mais rápidas e eficientes, um supercomputador Beowulf pode ser configurado recorrendo apenas a uma distribuição Linux *open-source standard* sem qualquer *software* adicional. A sua forma

---

<sup>3</sup>Um RAM *disk* ou RAM *drive* é uma parte da memória RAM (*Random Access Memory*) que o *software* trata como se se tratasse de uma unidade secundária de armazenamento.



mais simples é um sistema de dois nós constituído por dois computadores pessoais com Linux, que partilham pelo menos o directório `/home` do sistema via NFS (*Network File System*) e autorizam execuções de ambos os nós via `rsh` (*remote shell*).

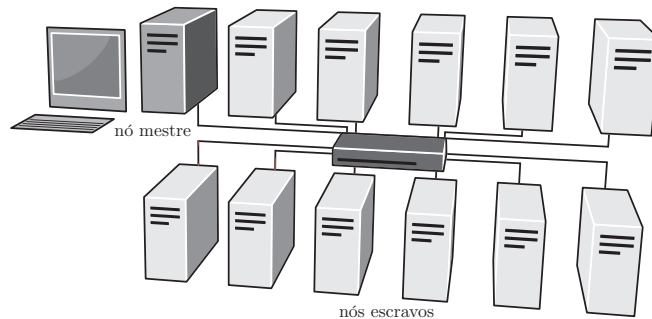


Figura 8.1: Representação esquemática de um *cluster* do tipo Beowulf.

Note-se que, apesar destas definições gerais, existe alguma variabilidade no tipo de *hardware* utilizado. Alguns desvios à abordagem *commodity* surgem quando a necessidade de maior desempenho leva à incorporação de material especializado, *i.e.* não de consumo geral. Assim, para facilitar a distinção entre sistemas, podem ainda classificar-se os *clusters* Beowulf como sendo de Classe I ou de Classe II. A Classe I designa as máquinas integralmente construídas a partir de componentes de consumo geral, *off-the-shelf*. As vantagens destes sistemas centram-se na disponibilidade de material, suporte ao nível da configuração de sistemas operativos e recurso a protocolos padrão. Em contrapartida, máquinas equivalentes de Classe II devem garantir melhor desempenho. A esta classe correspondem os *clusters* que tenham componentes específicos de fabricantes especializados. Estes tendem a garantir níveis de desempenho superiores. No entanto, tornam-se mais dispendiosos, dependem de determinados fornecedores e não garantem um suporte de configuração tão difundido [Galan *et al.* 2001].

Nas secções seguintes descrevem-se algumas questões relevantes na configuração de um sistema de Classe I. Adicionalmente, uma descrição geral de arquitectura de nós, rede e componentes periféricos comuns neste tipo de *clusters* Beowulf pode ser consultada no Apêndice C.

## 8.2 Cluster TaranTux

Como parte integrante deste trabalho, surgiu a oportunidade de montar e configurar um *cluster* do tipo Beowulf de Classe I. Denominado TaranTux, este sistema computacional encontra-se em funcionamento no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro. É actualmente utilizado para execução em cálculo paralelo de ferramentas pessoais ou recorrendo a programas comerciais como ABAQUS®.

Na figura 8.2 mostra-se o *cluster* TaranTux. Cada parte deste sistema será abordada em detalhe nas secções seguintes. Em particular, apresenta-se nas figuras 8.2(b) e (c) o sistema real, na sua localização e a configuração actual.

Nas secções que se seguem, descrevem-se as características gerais do sistema construído, quer a nível de *hardware* quer de *software*. Descreve-se o processo de instalação e configuração dos vários sistemas, com o intuito de poder funcionar não só como um guia de configuração do *cluster* descrito mas também como elemento de referência para a configuração de sistemas semelhantes.

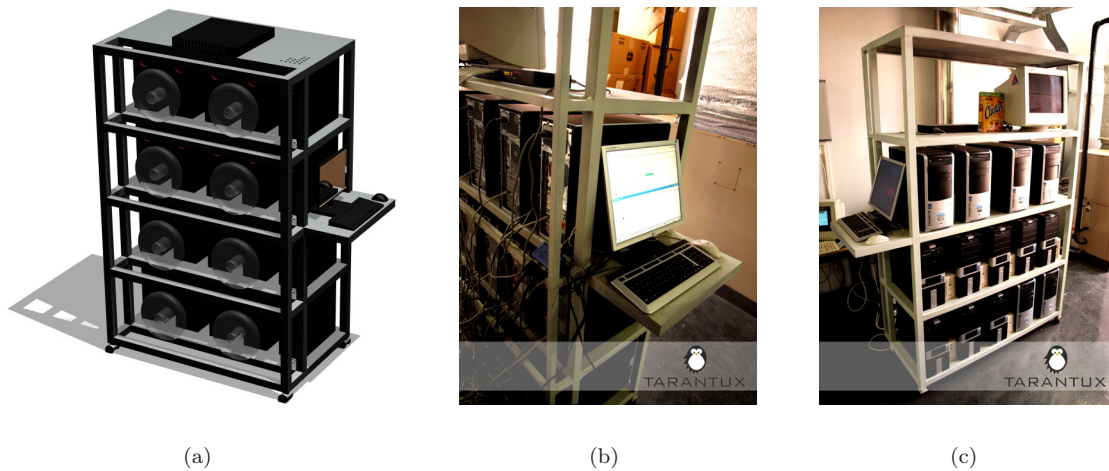


Figura 8.2: *Cluster* TaranTux: (a) modelação CAD do sistema e (b,c) sistema real no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro.

### 8.2.1 *Hardware* dos Nós

Ao construir um *cluster* existe uma grande variedade de questões a abordar. Por um lado, a escolha do *hardware* de acordo com os objectivos e requisitos do sistema. Por outro lado, questões como espaço e acondicionamento, refrigeração, e disponibilidade de energia e rede são também fulcrais. Apoio técnico e manutenção são ainda relevantes, quer numa fase de construção e configuração quer em fases posteriores. Uma das soluções mais expeditas corresponde a adquirir o sistema já montado e configurado, havendo grande variedade de soluções integradas. Apesar de mais simples e de garantir resultados em pouco tempo, esta abordagem é mais dispendiosa. Note-se que a maior estabilidade e garantia de qualidade de funcionamento pode perfeitamente justificar os custos acrescidos. A abordagem intermédia corresponde à aquisição dos diversos nós já montados segundo as especificações desejadas. Esta é uma prática comum com *clusters* Beowulf de Classe I, com a aquisição de computadores pessoais e dos periféricos necessários, procedendo depois à instalação das diversas máquinas e redes. Note-se que os *clusters* Beowulf de Classe I resultam frequentemente de opções tomadas também de acordo com restrições orçamentais mais apertadas. No entanto, têm como vantagem o controlo não só das características físicas do material utilizado mas também controlo o total do *software* e da configuração do sistema. Esta foi a abordagem adoptada neste trabalho. É ainda possível adquirir os diversos componentes individuais e proceder à montagem de todo o sistema, incluindo dos nós.

A montagem completa do sistema que aqui se descreve, no seu estado actual, foi concluída em Março de 2007. O *cluster* Beowulf TaranTux é constituído por 14 máquinas, 1 nó servidor e 13 nós cliente. Os diferentes nós têm as seguintes características comuns:

- Sistema Operativo OpenSuSE Linux 10.2 (32 bit);
- Motherboard ASUS P5VD2-MX - VIA P4M890; FSB800/1066; LGA 775; 2 DDR II 533 MHz; Placa gráfica Vga integrada 64MB; Controladora Ethernet integrada Fast Ethernet ASUSTeK VT6102 [Rhine-II] PCI 10/100 MB/s;
- Processadores do tipo x86 – Intel Core 2 Duo E6400 2.13 GHz skt775 2 Mb Cache bus 1066 MHz;
- Memória RAM 2x DDR 2 1024 Mb 533 MHz;

- Placa Realtek RTL-8169 Gigabit Ethernet PCI 10/100/1000 MB/s (32 bit);
- Cx MidiTow ATX - 350 W com tubo de ventilação lateral ATX;
- HDD 80 Gb 7200 rpm Serial-ATA;
- DVD-ROM 16x/48x.

O nó servidor tem as seguintes diferenças (neste caso, também é utilizada a controladora Ethernet integrada da *motherboard*):

- HDD 250 Gb 7200 rpm Serial-ATA II;
- DVD-ROM 16x/48x;
- Gravador de DVD.

Para além dos nós, é essencial utilizar equipamento adequado para a rede interna do *cluster*. É necessário utilizar comutadores de rede adequados, tanto em termos de número de portas quanto ao nível das velocidades de rede suportadas. A este nível, é ainda importante utilizar um meio físico adequado (*e.g.* para Gigabit Ethernet, o padrão adequado é a Categoria 6). É favorável algum tipo de acesso local, com GUI (*Graphical User Interface*) específico ou via consola. Diversas informações importantes são apresentadas durante a sequência de arranque do BIOS (*Basic Input/Output System*) e do próprio OS. Além disso, é muitas vezes conveniente trabalhar directamente nas máquinas (servidor e nós) para efeitos de configuração e manutenção. Neste sentido, a solução mais simples é o recurso a *hardware* de interface (teclado, rato e monitor), juntamente com um comutador para permitir a ligação a diferentes nós. Deve ainda utilizar-se algum tipo de sistema de *backup* de dados e também fontes auxiliares de alimentação. Estes componentes periféricos, no *cluster* TaranTux, resumem-se na seguinte lista:

- Monitor TFT-LCD 17 pol, teclado e rato;
- Data switch manual Kit 2PC USB - 1T+1R+1M;
- Switch/Gigabit Ethernet 16 portas 10/100/1000 (também ligado a UPS);
- Cabo de rede APC categoria 6e, duplo par entrançado blindado, RJ45 male, 10 m;
- Disco externo 350 Gb 3,5 pol USB 2.0 — sistema de *backup*;
- 6 APC Back-UPS CS 500 USB/Serial.

A configuração de *hardware* apresentada visou equilibrar restrições orçamentais com características adequadas. Reduziram-se os componentes ao essencial, obtendo ainda assim um sistema de computação paralela perfeitamente funcional e com boas características relativas de desempenho.

## 8.2.2 Software

A configuração de um *cluster* Beowulf de Classe I assenta na escolha de uma distribuição Linux, segundo uma licença GPL (*General Public License*). Note-se que existem distribuições Linux que não contêm ferramentas de servidor de rede, necessárias para a configuração do nó servidor. Algumas definições utilizadas dependem da distribuição de Linux seleccionada, mas são maioritariamente comuns, e obedecem a um conjunto de regras e estratégias normalmente replicáveis. Assim, para além de questões associadas à instalação e configuração do OS, deve obedecer-se ainda as passos seguintes [Pitanga 2004]:

1. Configuração dos endereços (IP) dos diversos nós;

2. Configuração de um sistema nomes de domínios através do arquivo `hosts`, sistema NIS (*Network Information System*) ou DNS (*Domain Name System*);
3. Criação de um sistema de permissões para comunicação e acesso entre os nós;
4. Permissão para a utilização de execuções remotas entre os vários nós;
5. Criação e distribuição de um sistema de armazenamento comum via NFS;
6. Instalação de bibliotecas de passagem de mensagens, PVM e/ou MPI;
7. Instalação de compiladores e outros elementos necessários para a produção de aplicações paralelas;
8. Instalação de aplicações de gestão de rede e nós.

Estas são as tarefas essenciais na configuração de um sistema funcional, resumidas nas secções seguintes.

#### 8.2.2.1 Sistema Operativo

Como já referido, a principal premissa na escolha do sistema operativo (OS) foi ser Linux. Estes sistemas operativos são baseados na arquitectura Unix<sup>4</sup>. As principais razões desta escolha prendem-se com as qualidades intrínsecas destes OS, mas principalmente com o facto de o seu código-fonte estar disponível sob licença GPL. Refira-se que a opção de utilizar *software* livre (*open-source*) abrange todos os componentes do OS e da sua configuração no âmbito deste trabalho. Assim, todo o *software* utilizado neste contexto é completamente gratuito e sempre que possível associado a licenças do tipo GPL, com completa liberdade de análise, manipulação e distribuição. Esta característica também significa que a licença é válida para todos os computadores do sistema de computação paralela, continuando igualmente válida para qualquer expansão que se faça ao sistema. É ainda uma das características-base da definição de *cluster* Beowulf aqui adoptada.

Existem diversas distribuições de sistemas operativos Linux. Depois de alguns testes e experiências com outras alternativas, a opção acabou por recair sobre a distribuição openSUSE Linux, patrocinada pela Novell. Esta distribuição (versão 10.2), aquando da configuração do sistema, foi a única a permitir ultrapassar todas as limitações encontradas noutras distribuições, nomeadamente a compatibilidade com discos rígidos S-ATA (*Serial Advanced Technology Attachment*) e S-ATA II, e incluir todas as ferramentas de servidor/cliente de rede necessárias à configuração de um *cluster*. Actualmente, o *cluster* TaranTux está em funcionamento com o OS openSUSE 10.2 (Linux kernel 2.6.18.2).

Antes da instalação do OS foi necessário atender a dois detalhes de configuração do sistema BIOS. Um deles diz respeito à necessidade de se desligar o evento *stop on keyboard error* nas várias máquinas, de modo a permitir o seu funcionamento sem teclado. Adicionalmente, devido à necessidade de associar licenças de *software* à placa de rede Gigabit do nó servidor (com um MAC-Address específico), exigindo a identificação `eth0` neste caso, desligou-se na BIOS (dispositivos *southbridge*) a placa interna. Esta foi activada e configurada depois de instalado o OS, ficando assim com o identificador `eth1`. Esta controladora Ethernet integrada (Fast Ethernet 100 MBit/s) é utilizada para permitir o acesso externo ao *cluster*, ficando ligada à LAN de servidores da Universidade de Aveiro. No caso dos nós clientes, esta controladora ficou desactivada, sendo que apenas necessitam de ligação à rede interna Gigabit do *cluster*. Depois disto, sendo que todos os nós têm disco rígido, procedeu-se à instalação do sistema operativo nos diversos computadores. Durante a instalação, os únicos cuidados específicos foram desactivar o `knetworkmanager`, garantindo a configuração manual de redes e o controlo de funcionamento com `ifup/ifdown`, bem como assinalar a opção *allow*

---

<sup>4</sup>O Linux foi desenvolvido por Linus Torvalds e representa o *kernel* (i.e. *núcleo*) do OS. O projecto GNU (*Gnu is Not Linux*) deu origem a um conjunto de aplicações de *software* livre que, sobre o *kernel* Linux, formam um OS completo e funcional.

*ssh* para permitir o acesso por *secure shell*. No caso do nó servidor, instalaram-se ainda todos pacotes essenciais para a sua configuração como tal. Foram ainda instalados os pacotes necessários para permitir a utilização de comandos *rsh*. Pelo facto de constituir uma ligação não-segura, o *rshd daemon* não vem activado por defeito em muitas distribuições mais recentes. É, no entanto, necessário para as comunicações e execuções remotas internas na rede do *cluster*, nomeadamente através de protocolos MPI.

#### 8.2.2.2 Configuração do Sistema

Após as secções anteriores, pretende-se estabelecer um guia geral de configuração deste tipo de sistemas. Atenda-se, no entanto, ao facto de esta sequência de operações, apesar de resumida e meramente exemplificativa, dever ser adaptada às particularidades da distribuição de Linux utilizada. Como já referido, chama-se também a atenção para a existência de um disco rígido em cada nó do *cluster* aqui descrito. No caso de configuração de nós escravos sem disco rígido, para além de outras limitações, é necessário recorrer a uma configuração RAM Disk e NFS a partir do nó servidor. No caso descrito, o protocolo NFS é utilizado apenas para as pastas pessoais do utilizadores e directórios associados à instalação de MPI.

O primeiro passo é a definição e a atribuição de endereços IP aos nós do sistema. Segundo a norma RFC 1918 da IANA<sup>5</sup> (*Internet Assigned Numbers Authority*), numa rede interna podem usar-se os seguintes blocos de endereços privados:

- 10.x.x.x;
- 172.16.x.x a 172.31.x.x;
- 192.168.x.x.

Na solução apresentada, optou-se pelo endereçamento de rede 10.0.0.x, com máscara de rede (*subnet mask*) 255.255.255.0. Este endereçamento pode ser efectuado de forma estática ou por protocolo DHCP (*Dynamic Host Configuration Protocol*). Este protocolo permite automatizar a configuração do protocolo TCP/IP (*Transmission Control Protocol/Internet Protocol*) em computadores registados. Pode ser usado para atribuir remota e automaticamente endereços IP, assim como outros dados de configuração como máscara de rede, DNS e *gateway*. O DHCP evita a necessidade de configurar manualmente todas estas definições para cada computador, sendo todas as definições geridas de forma central pelo administrador do sistema. No *cluster* TaranTux, quer o endereçamento interno quer o externo são feitos de forma estática, sendo o endereço externo determinado pela gestão de servidores da Universidade de Aveiro. A opção de endereçamento estático para a rede interna, por sua vez, deve-se à reduzida dimensão do sistema e ao controlo local pretendido.

Em termos de identificação de nomes e endereços dos nós na rede interna, assim como de reconhecimento e autorização entre máquinas, é necessário começar pela configuração do ficheiro */etc/hosts*. Existe ainda a alternativa de utilização de um serviço DNS ou NIS, especialmente se as dimensões do sistema o justificarem. Neste caso, em todos os nós é configurado o ficheiro */etc/hosts*:

```
127.0.0.1    localhost
10.0.0.1     head
10.0.0.101   wing01
10.0.0.102   wing02
:
10.0.0.113   wing13
```

---

<sup>5</sup>A IANA é a entidade responsável pela coordenação global de nomes de domínios, endereçamento IP e protocolos de comunicação da internet.

Para anular a necessidade de identificação com palavra-passe entre os nós do *cluster* é também necessário utilizar o ficheiro `/etc/hosts.equiv`. Este ficheiro define os *hosts* equivalentes em termos de segurança para acessos sem autenticação. Em redes genéricas, esta opção representaria riscos acentuados em termos de segurança. Num *cluster*, em contrapartida, esta opção é válida apenas na sua rede interna, sendo que as questões de segurança devem ser concentradas na ligação à rede externa, onde todo o sistema se identifica como uma única máquina. Esta abordagem é ainda um requisito do protocolo de acesso remoto *rsh* para comunicações e execuções livres no interior do *cluster*. O ficheiro `/etc/hosts.equiv` deve existir em todos os nós do sistema e tem uma configuração simples:

```
hosts.equiv
head
wing01
wing02
:
wing13
```

De forma muito semelhante surge ainda o ficheiro `.rhosts`. Este ficheiro deve ser colocado nos directórios pessoais dos diversos utilizadores (`/home/user`) e no directório `/root`. É também utilizado pelo protocolo *rsh*, permitindo ainda que os nós “confiem” num utilizador cujo *login* tenha sido efectuado noutra máquina. Tem o seguinte formato:

```
.rhosts
head
head
wing01
wing02
:
wing13
```

É ainda necessário configurar os ficheiros *inetd* ou *xinetd*, dependendo da distribuição de Linux, activando os comandos *remote*: *rsh*, *rlogin* e *rcp*. Estes comandos são importantes acima de tudo por serem utilizados pelas bibliotecas de passagem de mensagens (MPI e/ou PVM). Para o efeito é ainda necessário configurar o ficheiro `/etc/securetty`, de modo a autorizar ao utilizador *root* a ligação através de diferentes dispositivos de terminal TTY (derivado de *TeleTYpewriter*). A ligação do utilizador *root* é permitida na lista de terminais definida neste ficheiro, sendo bloqueada nos outros. Segue-se um exemplo de um ficheiro `/etc/securetty`, que deverá também ser repetido em todos os nós.

```
#/etc/securetty
tty1
tty2
tty3
tty4
rsh
rlogin
```

Será ainda necessário activar os serviços *rsh*, *rlogin*, *ssh* e *rexec* com o comando *ntsysv*. De seguida, deve iniciar-se o *daemon*<sup>6</sup> *xinetd* no directório `/etc/rc.d/init.d` (no openSUSE Linux, `/etc/init.d`) com o comando `./xinetd restart`, de modo a que o serviço seja activado a cada vez que o sistema seja reiniciado. Estes serviços podem ainda ser activados utilizando o YaST (*Yet another Setup Tool*), o sistema de instalação e gestão de sistema do openSUSE.

---

<sup>6</sup>Um *daemon* (*Disk And Execution MONitor*) é um programa informático responsável por executar processos em segundo plano num sistema operativo.



Outro elemento indispensável num *cluster* é o serviço *NFS*. Este serviço permite a criação de um sistema remoto de armazenamento, em que ficheiros e directórios são partilhados através da rede para serem utilizados remotamente por programas e utilizadores como se fossem locais. Assim, qualquer nó pode aceder a informação que se encontra num disco central, neste caso o disco do nó servidor, como se fosse uma pasta no seu disco local. O *NFS* exporta todos os directórios definidos no serviço para os clientes remotos e estes integram estes directórios na sua estrutura local. No *cluster* TaranTux o serviço *NFS* partilha os directórios */home* e */usr/local*, de modo a que as pastas pessoais dos utilizadores sejam acessíveis a partir de qualquer nó, assim como um conjunto de configurações, e acesso a programas e atalhos contidos no directório */usr/local*. Note-se ainda que, assim, elementos de configuração de utilizador como o ficheiro *.rhosts* são automaticamente actualizados em todos os nós. Para activar o serviço *NFS* é necessário configurar o nó servidor para exportar os directórios via rede e os nós clientes para montarem estas localizações de armazenamento remoto na sua estrutura de armazenamento local. No nó servidor é necessário acrescentar os directórios em causa e as definições associadas ao ficheiro */etc/exports*. Neste caso, acrescentaram-se as seguintes linhas:

```
/usr/local *(rw,no_root_squash)
/home      *(rw,no_root_squash)
```

Entre outros marcadores possíveis, *rw* é utilizado para permitir leitura e escrita, e o marcador *no\_root\_squash* para permitir o recurso a privilégios de superutilizador (*root*). É ainda necessário iniciar o servidor *NFS*, o que pode ser feito através do *YaST* ou com os comandos *./nfs stop* e *./nfs start* no directório */etc/rc.d/init.d*. Deve também configurar-se a activação automática do servidor *NFS*, através do *YaST* ou através do gestor de serviços usando o comando *chkconfig*. Depois do servidor activar o *NFS*, os clientes montam os directórios disponibilizados. Cada cliente pede autorização ao servidor para montar as localizações que pretende, e este verifica se existem e se foram efectivamente exportados, autorizando o acesso. O sistema de ficheiros pode ser montado de forma manual, usando o comando *mount* para cada localização. Faz, no entanto, mais sentido fazer uma montagem automática. A forma mais expedita de o fazer é acrescentando as localizações na tabela do sistema de ficheiros, localizada no ficheiro */etc/fstab*. Neste caso, em todos os nós, basta acrescentar as seguintes linhas:

```
10.0.0.1:/usr/local /usr/local nfs rw,soft,intr 0 0
10.0.0.1:/home     /home     nfs rw,soft,intr 0 0
```

Neste ponto, os diferentes nós têm todas as configurações necessárias para comunicar livremente entre si. Adicionalmente, este procedimento é suficiente para acrescentar um novo nó cliente, e facultar a sua identificação e autorização.

Num sistema distribuído é importante que se garanta o sincronismo dos relógios dos diferentes nós. Na realidade, os algoritmos de processamento paralelo e distribuído utilizados neste trabalho executam processos de acordo com o relógio local. A sincronização de relógios torna-se assim útil não só para a determinação de parâmetros de desempenho e verificação, mas também ao nível de gestão de processos, sincronização de tarefas, *etc.* Este sincronismo pode ser garantido por um serviço que, não sendo indispensável, é importante nesta aplicação. Utiliza-se para o efeito um servidor *NTP* (*Network Time Protocol*). Recorre-se aqui a um servidor *NTP* externo para acertar o relógio do nó servidor, funcionando este como servidor interno para sincronizar os relógios dos nós clientes. Configura-se o ficheiro */etc/ntp.conf* de modo a sincronizar com o servidor remoto (ou com o próprio relógio) e fazer *broadcast* para os clientes, e configuram-se os clientes para utilizar o nó servidor como servidor *NTP*. O ficheiro */etc/ntp.conf* terá uma configuração para o nó servidor semelhante a:

```
driftfile /var/lib/ntp/ntp.drift
server pool.ntp.org
```

```
server 127.127.1.0
fudge 127.127.1.0 stratum 10
authenticate no
```

e para os nós clientes:

```
driftfile /var/lib/ntp/ntp.drift
server 10.0.0.1
authenticate no
```

É então necessário iniciar o *daemon* `ntpd` (`ntp` no openSUSE) no servidor e depois nos clientes, utilizando o comando `service ntp start`.

Um elemento indispensável à utilização deste sistema para o tipo de computação paralela e distribuída apresentado neste trabalho diz respeito à utilização de mecanismos de passagens de mensagens. Como estes sistemas têm memória distribuída, é necessário proceder à transmissão de dados e instruções entre os diferentes processos em execução. No *cluster* TaranTux utiliza-se a biblioteca MPICH (1.2.7) [Gropp e Lusk 2005], uma implementação gratuita do padrão MPI 1 (*vd.* Sec. 3.4). Em termos de instalação do MPICH, as operações a realizar são padronizadas. Depois de configuradas as permissões e acessos `rsh`, basta seguir a instalação indicada pelo fornecedor. Neste caso em particular, surgem algumas complexidades associadas à configuração e compilação com o compilador de Fortran da Intel, devido à necessidade de compilar o MPICH com este compilador em vez do compilador nativo de Fortran (GNU Fortran). Depois de instalar o compilador da Intel, começa-se por associar os comandos `F77` e `F90` ao comando `ifort` (`export F90=ifort` e `export F77=ifort`). Segue-se a configuração geral do MPICH<sup>7</sup> para a instalação, com

```
#./configure --prefix=/usr/local/mpich127 --with-device=ch_p4
--with-arch=linux
```

De seguida, executa-se o comando `make`, após o qual se deve verificar se foram criados os comandos `mpif77` e `mpif90`. As ferramentas descritas neste trabalho são compiladas utilizando `mpif90`, que faz a compilação do código integrando o compilador original com a ligação aos comandos e bibliotecas específicas da implementação do MPI (objectos compilados em C). Falta ainda a instalação efectiva do MPICH, depois de devidamente compilado e configurado. Basta para isso executar `make install`, forçosamente como administrador. Aconselha-se ainda, para garantir que todos os utilizadores têm permissão para executar comandos MPI e que não é necessário fornecer todo o *path* a cada execução, a introdução das seguintes instruções:

```
#/usr/local/mpich127/chmod -R 777 *
#/usr/local/bin/ln -sf /usr/local/mpich127/bin/mpirun mpirun
#/usr/local/bin/ln -sf /usr/local/mpich127/bin/mpif90 mpif90
#/usr/local/bin/ln -sf /usr/local/mpich127/bin/mpif77 mpif77
```

Falta apenas fornecer ao MPICH a lista dos nós a utilizar, através do ficheiro `machines.LINUX` localizado no directório `/usr/local/mpich127/share/` e realizar um teste básico de ligação executando `/usr/local/mpich127/sbin/tstmachines -v`. A partir deste momento, é possível a qualquer utilizador autorizado executar programas em paralelo utilizando o comando genérico

```
#mpirun -np  $n_p$  programa,
```

onde  $n_p$  corresponde ao número de processadores a utilizar. Para além desta declaração mínima, destacam-se ainda pela sua utilidade parâmetros opcionais como, por exemplo, `-nolocal`, para que o nó local não seja utilizado ou `-machinefile ficheiro`, usado para especificar os processadores a utilizar. Note-se ainda que esta configuração disponibiliza ainda a alternativa `mpiexec`, equivalente a `mpirun`.

---

<sup>7</sup>Na biblioteca MPICH, a definição `ch_p4` é associada a ambientes de memória distribuída, com a alternativa `ch_shmem` para memória partilhada.



### 8.2.3 Monitorização e Gestão

Na configuração de sistemas de computação paralela e, em particular, de *clusters* Beowulf, o desempenho e a sua optimização dependem largamente da sua monitorização e da forma como é gerido. Por um lado, é essencial fazer a expedita detecção de erros ou problemas associados a comunicações ou ao funcionamento de nós individuais. Por outro lado, uma correcta monitorização pode fornecer informações essenciais relativamente a limitações de desempenho e orientar a sua resolução. Mais ainda, a gestão de uma plataforma paralela pode tornar-se um trabalho árduo se não acompanhada das ferramentas correctas. Os dois níveis mais importantes de gestão de um *cluster* são os utilizadores e os recursos. É essencial que a gestão de contas, controlo de permissões e acessos, e reserva de espaço de armazenamento sejam feitos de modo eficiente e invisível, especialmente quando o número de utilizadores autorizados é considerável. A gestão de recursos, por sua vez, vai ditar muito da eficiência, actuando ao nível da gestão de fila (no sentido de *queuing*), selecção de nós, *etc.* Em qualquer dos casos, existem inúmeras aplicações que permitem realizar estas tarefas. Existe também uma grande dispersão de características de cada uma delas, desde o tipo de interface ao nível de controlo que permitem. A exploração exaustiva das alternativas existentes a este nível divergem do âmbito deste trabalho, pelo que apenas se referem brevemente as ferramentas *open-source* utilizadas no contexto da gestão do *cluster* TaranTux.

Uma das ferramentas de utilidade mais imediata é o programa *bWatch* (*beowulf Watch*). Este programa, desenvolvido em Tcl/Tk por Jacek Radajewski, permite monitorizar todos os nós activos de um *cluster* através de uma interface gráfica que mostra os parâmetros de funcionamento mais importantes dos diversos nós. Funciona segundo o pressuposto de que qualquer máquina listada na variável `$listOfHosts` é capaz de comunicar por *rsh*, utilizando comunicação remota para verificar periodicamente o funcionamento de cada nó. Este *script*, invocado com `bwatch.tcl`, pode ser executado por qualquer utilizador, desde que com autorização para comunicar via *rsh*. É necessário fornecer ao programa a lista de nós pertencentes ao *cluster*. Isto é feito através da definição `set listOfHosts {mestre escravo1 ... escravon}` no ficheiro `.bWatchrc.tcl` (directório `root` ou `home`, dependendo do tipo de utilizador).

Outro tipo de monitorização utilizada neste trabalho concerne a temperatura de alguns elementos de *hardware* do *cluster* TaranTux. Utiliza-se aqui uma livreria de funções de monitorização de sistemas Linux chamada *Lm-sensors*. Incluída na distribuição utilizada, esta livreria contém um conjunto de funções de ligação ao *hardware* controlador de diversos dispositivos e sensores, dependentes da *motherboard*. Para a sua instalação, basta activar o *package* respectivo e executar o comando `sensors-detect` como administrador. Este detecta todos os sensores suportados na configuração de *hardware* em análise e cria um ficheiro de controlo `sensors.conf`. Note-se que pode ser necessário fornecer ao serviço módulos adicionais de ligação ao *hardware*, normalmente controlados no ficheiro `etc/modules.conf`. O serviço `lmensors` é activado usando o gestor de serviços do sistema e o seu funcionamento pode ser verificado através do comando `sensors`. Este deverá fornecer informações acerca de temperaturas, nomeadamente dos núcleos do processador, diferenças de potencial, velocidades de rotação de ventoinhas, *etc.* O serviço pode ainda ser configurado para escrever estas leituras num ficheiro predefinido com uma determinada frequência. Esta configuração pode também ser feita através do programa nativo de monitorização `ksysguard`.

Ao nível da gestão de recursos, existem programas CMS (*Cluster Management System*) que permitem adequar os recursos existentes à ordem e ao nível de necessidades dos processos submetidos pelos utilizadores. Estes programas estabelecem ordens de execução (escalonamento ou *scheduling*), filas de espera (*queuing*), fazem a selecção dos recursos, nomeadamente nós onde os processos possam ser executados, estabelecem prioridades e monitorizam as execuções, fornecendo informação actualizada ao administrador do sistema e aos utilizadores. Estas aplicações fornecem serviços como:

- Execução de tarefas em modo *batch*;
- Controlo de aplicações paralelas com MPI ou PVM;

- Sistema de interface com os utilizadores, permitido algum controlo sobre parâmetros e opções de configuração da execução de processos;
- Utilização de pontos de controlo e eventual migração de processos em caso de falhas no sistema;
- Balanceamento de carga, de modo a otimizar a utilização dos diferentes nós;
- Controlo de tempos de execução de tarefas;
- Serviços de verificação de estado actual;
- Serviços de ligação remota e autenticação segura.

No sistema aqui descrito, utiliza-se o gestor de recursos **TORQUE** com o *Maui Cluster Scheduler*. Ambos são expansões do sistema original de gestão de recursos **OpenPBS**<sup>8</sup>. Este permite a utilização de uma interface própria, com *scripts* e comandos que dizem ao sistema qual a configuração da execução que se pretende. O sistema, por sua vez, faz toda a gestão da execução processo, decidindo quando e onde deverá ser executado, e informando o utilizador do seu estado actual e da ocupação do sistema.

Utiliza-se ainda um sistema de limitação de espaço de armazenamento, recorrendo à definição nativa de *user quota* do openSUSE (serviço *quota*). Essencialmente, este serviço destina-se a limitar o espaço ocupado em disco pela conta de cada utilizador. As quotas são geridas utilizador a utilizador ou por grupos. Para a utilização deste serviço é necessário definir a sua actuação nos sistemas de ficheiros adequados, no directório */home*. Isto faz-se acrescentando as opções **usrquota** e **grpquota** ao ficheiro **etc/fstab** (*vd.* Sec. 8.2.2.2). É ainda necessário criar ficheiros de gestão de quotas (**aquota.user**, **aquota.group**), remontar a partição respectiva e iniciar o serviço. A partir do momento em que este serviço está em funcionamento, a gestão de quotas pode ser feita editando os limites através do comando **edquota -u username** para utilizadores ou **edquota -u group** para grupos de utilizadores.

#### 8.2.4 Âmbito de Utilização

O sistema aqui descrito é utilizado exclusivamente em ambiente académico. Este sistema serve de base de desenvolvimento de ferramentas computacionais em processamento paralelo e tem contribuído para a formação das pessoas envolvidas na sua gestão e configuração a diversos níveis. No que concerne todas as questões associadas à configuração tanto do sistema operativo quanto das diversas ferramentas utilizadas, utiliza-se sempre *software* livre. Especificamente ao nível do cálculo paralelo, esta plataforma permite a realização de diversos ensaios e testes necessários nesta temática. Mesmo à medida que o *hardware* se vai tornando obsoleto, uma inegável inevitabilidade no que concerne a equipamento informático, toda a análise de desempenho das mais variadas ferramentas computacionais pode ser feita em termos relativos.

### 8.3 Considerações Adicionais

Apesar da constante evolução das plataformas e configurações de processamento a nível computacional, os *clusters* Beowulf continuam a ser uma excelente aposta na relação custo/benefício. Ao nível académico, permitem uma grande variedade de configurações, testes e tipos de análise, mesmo com *hardware* menos actual. A maioria dos tipos de implementação permite avaliar desempenho ao nível de *speed-up* e escalabilidade, com resultados ao nível da paralelização e da optimização do código facilmente extrapoláveis para configurações mais potentes. Existe actualmente, no entanto,

---

<sup>8</sup>O **OpenPBS**, sigla de *Open Portable Batch System*, é um sistema *opensource* de gestão de recursos de sistemas de computação paralela originalmente desenvolvido pela Beridian Systemas para a NASA no início dos anos 90.

alguma migração para um tipo de paralelização mista, fruto da crescente capacidade de processamento simultâneo de *threads* dos processadores actuais. Para além de núcleos com características *multithreading*, a quantidade de núcleos por processador continua a crescer. Neste sentido, cada nó adquire capacidade de computação paralela, numa arquitectura interna de memória partilhada. Assim, a abordagem do desenvolvimento de sistemas e metodologias de computação paralela de pequenas e médias dimensões deve ser revista, ponderando a separação interna de fluxo de instruções e dados com a distribuição dos mesmos. Recorrendo a protocolos como o OpenMP é possível paralelizar algoritmos de execução de forma automática e, numa primeira abordagem, relativamente simples em termos de implementação de ciclos internos de um código. Em muitos casos, os benefícios são por si só acentuados. Cada vez mais, a paralelização (em *clusters* com *hardware* de Classe I) deve funcionar a dois níveis, aproveitando esses benefícios e complementando-os com a componente de cálculo paralelo e distribuído de memória não-partilhada nos diferentes nós.

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Parte IV

# Apresentação, Validação e Discussão de Resultados



## Capítulo 9

# Validação e Resultados Preliminares

*Discutem-se os resultados de ensaios numéricos de teste e validação.  
Analisa-se o desempenho do programa mainFRAN em diferentes  
aplicações, com ênfase na optimização topológica e cálculo multiescala.*

---

### 9.1 Introdução

O programa mainFRAN, desenvolvido ao longo deste trabalho, permite a resolução de uma variedade de problemas de simulação numérica. Para além de problemas de termoelasticidade resolvidos pelo método dos elementos finitos, pode ser uma ferramenta de avaliação de propriedades equivalentes de materiais compósitos ou um programa de optimização topológica com diversos modos de cálculo e inúmeras opções de processamento.

Na tabela 9.1 ilustra-se a estrutura geral do presente capítulo. Este apresenta a resolução de problemas especificamente seleccionados para ilustrar o funcionamento do programa desenvolvido em termos de optimização topológica, elemento principal no âmbito deste trabalho. Começa-se, no entanto, por realizar alguns estudos de aplicação da metodologia de Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA), cujo funcionamento é essencial ao nível dos procedimentos multiescala de optimização topológica aqui abordados. Mostram-se também a utilização de Células Representativas Unitárias (CRU) de secção hexagonal, assim como exemplos de aplicação multiescala com localização. Apresentam-se depois problemas gerais de optimização topológica, incluindo aplicações em termoelasticidade e de cálculo multiobjectivo, onde se inserem também problemas de condução de calor. Neste ponto, os resultados apresentados sustentam a apresentação de resultados relacionados com a optimização ao nível do material, conduzindo à secção de optimização topológica multiescala. Esta, por sua vez, divide-se em três subsecções distintas. Assim, apresentam-se aplicações de optimização isolada do material constitutivo, de optimização macroestrutural com homogeneização de materiais prescritos não-isotrópicos, e de optimização simultânea de estrutura e material, com a optimização hierárquica.

Refira-se que ao nível da optimização topológica usam-se neste capítulo essencialmente problemas bidimensionais. Estes permitem uma mais fácil percepção dos fenómenos numéricos que se pretendem ilustrar, sendo a maioria das conclusões retiradas extrapoláveis para problemas tridimensionais. No entanto, exemplos destes problemas são também apresentados sempre que se julga conveniente.

Tabela 9.1: Estrutura geral do capítulo Validação e Resultados Preliminares (Cap. 9).

Homogeneização por Expansão Assimptótica
~ Análise de Propriedades de Materiais Compósitos
~ Células Representativas Unitárias Hexagonais
~ Cálculo Multiescala e Localização
Optimização Topológica
~ Estudos Gerais
~ SIMP e Implicações Numéricas
~ Abordagem Aproximada
~ Termoelasticidade
~ Cálculo Multiobjectivo
Optimização Topológica Multiescala
~ Optimização de Material
– Abordagem Local
– Homogeneização Inversa
~ Optimização Macroestrutural
~ Optimização Hierárquica em Elasticidade

## 9.2 Homogeneização por Expansão Assimptótica

A homogeneização por expansão assimptótica, abordada em detalhe nos Capítulos 6 e 7, é uma metodologia que permite a análise do comportamento de materiais celulares e compósitos com heterogeneidades periódicas. Por um lado, constitui uma ferramenta de cálculo de propriedades equivalentes destes materiais. Por outro lado, integra a avaliação do material em procedimentos multiescala, com a avaliação das heterogeneidades ao nível da microescala e o cálculo macroestrutural como se de um material homogéneo se tratasse. Nesta secção, atendendo ao facto de esta metodologia ser de elevada importância na resolução dos problemas de optimização abordados neste trabalho, procede-se à ilustração do seu funcionamento. Apresentam-se para o efeito exemplos 2-D e 3-D, com células representativas unitárias quadradas e cúbicas convencionais, assim como com CRU rectangulares e paralelepípedicas ou de secção hexagonal. Ilustra-se ainda o funcionamento da metodologia inversa associada à HEA, designada usualmente por localização.

### 9.2.1 Análise de Propriedades de Materiais Compósitos

Uma das vantagens da homogeneização por expansão assimptótica é o facto de não depender de distribuições de material específicas, desde que sejam periódicas. Assim, oferece uma elevada flexibilidade no cálculo de propriedades equivalentes e informação constitutiva de materiais compósitos e celulares. Esta característica permite ainda que os seus resultados sejam coerentes em optimização topológica, independentemente da distribuição de material obtida. Para ilustrar o funcionamento da HEA, analisa-se o comportamento termoelástico de um material compósito reforçado com fibras cilíndricas contínuas e unidireccionais. A célula representativa unitária (CRU) utilizada apresenta-se esquematicamente na figura 9.1. No caso bidimensional, utiliza-se a geometria correspondente ao plano  $x_1Ox_2$ , transversal à direcção longitudinal das fibras. Os casos aqui apresentados correspondem a um Estado Plano de Tensão (EPT). Por um lado, face ao Estado Plano de Deformação (EPD), permite que a análise aqui apresentada seja equivalente ao caso 3-D, com matrizes constitutivas idênticas. Por outro lado, os problemas de optimização topológica 2-D abordados neste trabalho são comumente relativos a placas de pouca espessura, coerentes com estados planos de tensão [Dowling 1999, Hassani e Hinton 1999, Rozvany *et al.* 2006]. Note-se, no entanto, que, enquanto a avaliação desta distribuição de constituintes em estado plano de deformação aproxima o comportamento de compósitos reforçados com fibras contínuas, o estado plano



de tensão tende a aproximar o comportamento de placas de pouca espessura com partículas de reforço.

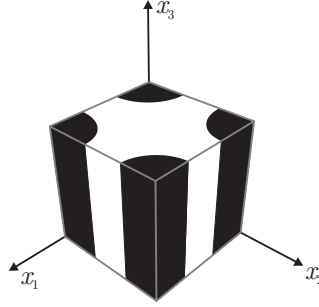


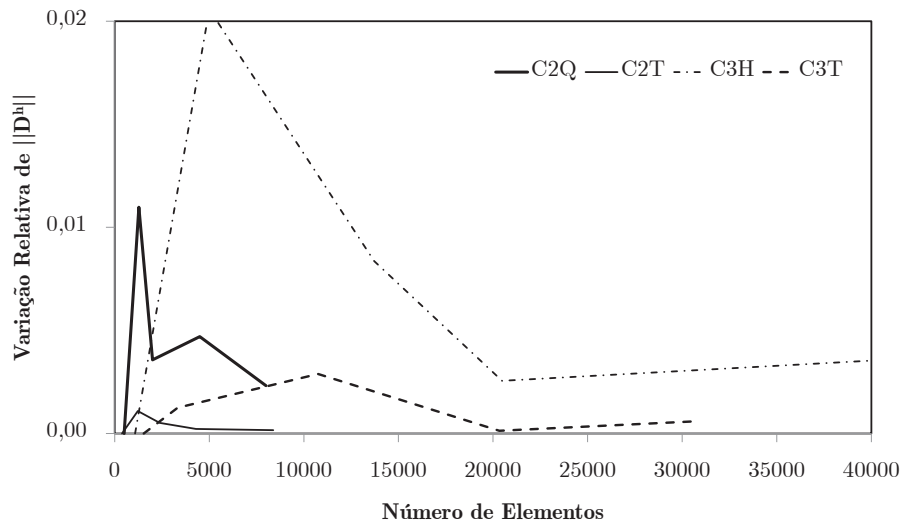
Figura 9.1: Representação esquemática da célula representativa unitária de um material compósito reforçado com fibras unidireccionais contínuas segundo um arranjo quadrado.

O material compósito estudado é constituído por uma matriz de alumínio (Al) e reforço de boro (B), cujas propriedades termomecânicas são apresentadas na tabela 9.2 [Kenaga *et al.* 1987, Lonnberg *et al.* 1998, Teixeira-Dias 1999, Pinho-da-Cruz 2007]. As propriedades equivalentes (homogeneizadas) do material compósito são calculadas para uma fracção volúmica de reforço  $f_r = 47\%$ . Realizam-se ensaios utilizando diferentes tipos de elementos lineares: (i) triângulos (TR3) e (ii) quadriláteros (QD4), para o caso 2-D, e (iii) tetraedros (TT4) e (iv) hexaedros (HX8), para o caso 3-D. A utilização de elementos quadráticos garante uma menor dependência do grau de refinamento da malha, mas não são apresentados nesta análise [Pinho-da-Cruz 2007, Oliveira *et al.* 2009a]. As malhas utilizadas foram geradas respeitando análises de convergência de malha realizadas, considerando a evolução da norma de Frobenius associada às matrizes constitutivas homogeneizadas obtidas com cada tipo de elemento finito [Rizzo 1991, Oliveira *et al.* 2009a]. Note-se que na aplicação da HEA a convergência depende não só do número de graus de liberdade mas também do número de elementos finitos. Isto deve-se ao facto de as matrizes homogeneizadas serem calculadas como ponderações volúmicas das propriedades microestruturais corrigidas com os gradientes das propriedades elementares na célula representativa unitária. Assim para além de um número de Graus de Liberdade (GL) adequados a uma correcta aproximação, a HEA necessita de um número de elementos suficiente para que as propriedades sejam correctamente ponderadas [Oliveira *et al.* 2009a]. Mostra-se na figura 9.2 um exemplo de análise de convergência, com a evolução relativa da norma da matriz de elasticidade  $\mathbf{D}^h$ ,  $||\mathbf{D}^h||$ , com o refinamento sucessivo para 5 malhas de cada tipo de elementos finito. O comportamento aqui ilustrado é coerente com o observado para as restantes matrizes constitutivas e propriedades equivalentes obtidas. Note-se que a convergência para malhas bidimensionais é aparentemente mais rápida que para as tridimensionais. Isto deve-se ao facto de, no problema em análise, o refinamento nos problemas 2-D se concentrar no plano transversal à direcção longitudinal das fibras de reforço, traduzindo mais facilmente as heterogeneidades nesse plano. Na direcção longitudinal, a HEA tende a resultar em propriedades equivalentes idênticas às da lei das misturas para associações de constituintes em paralelo, correspondente ao limite analítico de Voigt [Voigt 1889, Oliveira *et al.* 2009a].

Constata-se uma reduzida dependência dos valores calculados face ao grau de refinamento de malha. Em termos de grau de confiança dos resultados esta é uma importante constatação, visto que, por questões de custo de processamento, as malhas de elementos finitos utilizadas nos procedimentos de optimização topológica multiescala apresentados neste trabalho tendem a ser pouco refinadas. Atendendo à rápida convergência de resultados, com variações inferiores a 1% face ao refinamento anterior na generalidade dos parâmetros avaliados, optou-se pelas malhas apresentadas na figura 9.3 para proceder à análise de resultados. Estas apresentam boas aproximações e são refinadas o suficiente para uma correcta ilustração gráfica de resultados. São constituídas por

Tabela 9.2: Propriedades termoelásticas da matriz (m) e reforço (r) do material compósito de alumínio reforçado com fibras de boro.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade da matriz, $E_m$ [GPa]	68,3
Coefficiente de Poisson da matriz, $\nu_m$ [-]	0,3
Coefficiente de condutividade térmica da matriz, $k_m$ [Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	171
Coefficiente de expansibilidade térmica da matriz, $\alpha_m$ [K <sup>-1</sup> ]	$23 \times 10^{-6}$
Módulo de elasticidade do reforço, $E_r$ [GPa]	379,3
Coefficiente de Poisson do reforço, $\nu_r$ [-]	0,1
Coefficiente de condutividade térmica do reforço, $k_m$ [Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	27,4
Coefficiente de expansibilidade térmica do reforço, $\alpha_m$ [K <sup>-1</sup> ]	$6,4 \times 10^{-6}$

Figura 9.2: Evolução da norma da matriz de elasticidade homogeneizada,  $\|\mathbf{D}^h\|$ , com o refinamento das malhas de elementos finitos utilizadas.

4300 elementos triangulares (Fig. 9.3(a)), 4500 elementos quadrangulares (Fig. 9.3(b)), 20332 elementos tetraédricos (Fig. 9.3(c)) e 20480 elementos hexaédricos (Fig. 9.3(d)).

Verifica-se que os materiais analisados têm um comportamento ortotrópico. Um material ortotrópico tem propriedades que dependem da sua orientação, sendo válidas para um sistema de três planos de simetria —  $x_1Ox_2$ ,  $x_2Ox_3$  e  $x_1Ox_3$  (vd. Fig. 9.1) [Dowling 1999]. Verifica-se ainda que o material aqui estudado corresponde a um caso especial de material ortotrópico, definido como tetragonal, com uma matriz de elasticidade

$$\mathbf{D}^h = \begin{bmatrix} D_{11}^h & D_{12}^h & D_{31}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{12}^h & D_{11}^h & D_{31}^h & 0 & 0 & 0 \\ D_{31}^h & D_{31}^h & D_{33}^h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44}^h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{55}^h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{55}^h \end{bmatrix}. \quad (9.1)$$

Este material tem um comportamento próximo do de um material transversalmente isotrópico, mas a aparente isotropia no plano transversal à direcção longitudinal das fibras é também depen-

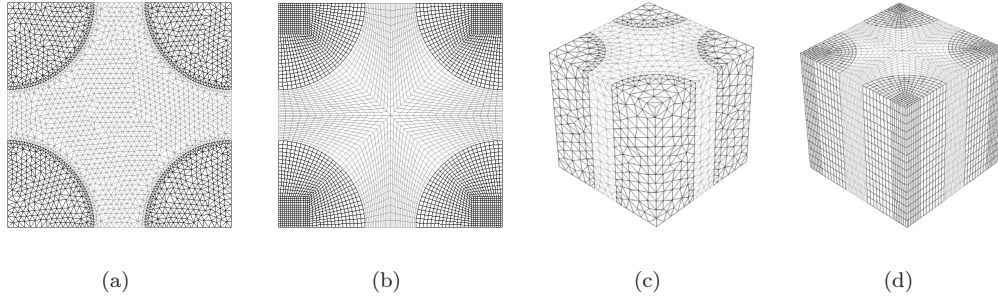


Figura 9.3: Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise. Células representativas unitárias 2-D, discretizadas em (a) triângulos e (b) quadriláteros, e 3-D, discretizadas com (c) tetraedros e (d) hexaedros.

dente da orientação<sup>1</sup> [Banks-Sills *et al.* 1997]. Isto encontra-se ilustrado nos gráficos de isotropia da figura 9.4, onde se mostra, no plano transversal, a dependência do coeficiente de elasticidade transversal com a orientação para (a) um caso isotrópico e (b) o caso presente. O comportamento ortotrópico deste material reflecte-se também no seu comportamento termomecânico e no comportamento térmico, resultando em propriedades equivalentes também dependentes das orientações. Em qualquer caso é possível obter as propriedades equivalentes a partir das respectivas matrizes constitutivas. Enquanto a matriz de condutividade térmica homogeneizada fornece automaticamente o coeficiente de condutividade térmica homogeneizado, para cada direcção, na diagonal da matriz de condutividade térmica, o caso mecânico necessita de alguma manipulação matemática. A inversão da matriz de elasticidade  $\mathbf{D}^h$  resulta, para um material tetragonal, na matriz de flexibilidade homogeneizada

$$\mathbf{S}^h = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{11}} & \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{-\nu_{31}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{11}} & \frac{-\nu_{31}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{31}}{E_{33}} & \frac{-\nu_{31}}{E_{33}} & \frac{1}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{31}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{31}} \end{bmatrix}, \quad (9.2)$$

de onde é possível retirar as propriedades mecânicas homogeneizadas.  $E_{33}$  e  $E_{11}$  são os módulos de elasticidade relativos às direcções longitudinal e transversal das fibras de reforço, respectivamente.  $G_{31}$ ,  $\nu_{31}$ ,  $G_{12}$  e  $\nu_{12}$  são os módulos de corte e coeficientes de Poisson associados às direcções 3–1 e 1–2, respectivamente. Os coeficientes de expansibilidade térmica homogeneizados, por sua vez, são obtidos através da multiplicação da matriz de flexibilidade homogeneizada pelo vector homogeneizado dos módulos térmicos (*vd.* Eq. 7.40). Refira-se que em problemas 2-D, considerando o plano transversal à direcção longitudinal das fibras ( $x_1 O x_2$ ), as matrizes correspondentes podem ser obtidas por supressão das linhas e colunas relativas a esta direcção ( $O x_3$ ). No caso da matriz de flexibilidade, corresponde neste caso a um estado plano de tensão.

A manipulação das componentes associadas aos diversos vectores e matrizes homogeneizados permite o cálculo de propriedades homogeneizadas do material compósito estudado. As propriedades elásticas<sup>2</sup> são resumidas na tabela 9.3, juntamente com resultados numéricos (N), de previsão

<sup>1</sup>Um material transversalmente isotrópico tem apenas duas propriedades independentes no plano de isotropia, onde  $D_{44}^h = \frac{D_{11}^h - D_{12}^h}{2}$ .

<sup>2</sup>Note-se que o coeficiente de Poisson  $\nu_{ij}$  está relacionado fisicamente com uma contracção na direcção  $j$  quando existe uma tracção na direcção  $i$ . Os restantes coeficientes de Poisson podem calcular-se como  $\left(\frac{\nu_{ij}}{E_i} = \frac{\nu_{ji}}{E_j}\right)$ .

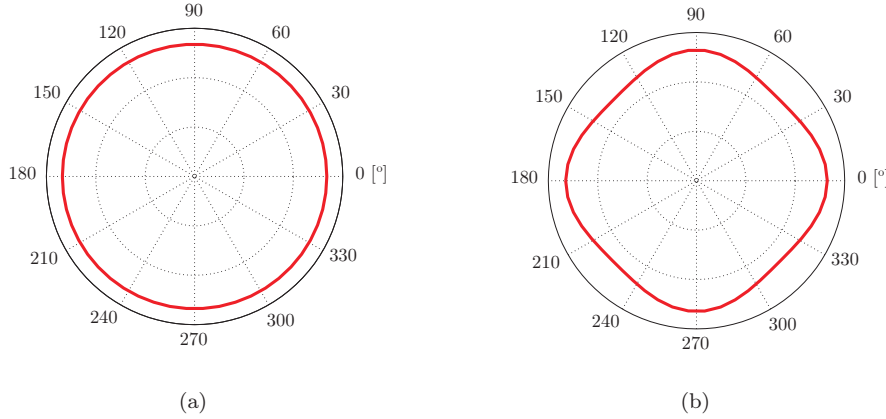


Figura 9.4: Gráficos de anisotropia plana, com a variação do coeficiente de elasticidade transversal com a orientação, para (a) um material isotrópico e (b) um material tetragonal.

analítica (A) e experimentais (E) [Kenaga *et al.* 1987]. Xia *et al.* [Xia *et al.* 2003] apresentam resultados numéricos obtidos com uma combinação do método dos elementos finitos com condições de fronteira de periodicidade explícitas baseadas nos modelos micromecânicos desenvolvidos por Suquet [Suquet 1987]. Sun e Vaidya [Sun e Vaidya 1996] apresentam resultados numéricos baseados na conjugação de princípios de energia de deformação equivalente com o método dos elementos finitos, apresentando resultados quer para distribuições quadradas (SQR) quer para distribuições hexagonais (HEX) de fibras de reforço. Pinho-da-Cruz [Pinho-da-Cruz 2007, Oliveira *et al.* 2009a] apresenta resultados numéricos utilizando também a homogeneização por expansão assintótica, com malhas de elementos finitos tetraédricos. Por outro lado, os resultados de previsão analítica de Whitney e Riley [Whitney e Riley 1966] são baseados em métodos de ponderação energética derivados da teoria clássica da elasticidade. Os resultados analíticos apresentados por Sun and Chen [Sun e Chen 1991] e Chamis [Chamis 1984], por sua vez, são baseados em modelos micromecânicos envolvendo condições de continuidade e de equilíbrio de forças. Verifica-se em primeiro lugar que os valores obtidos com elementos tetraédricos (TT4) são praticamente coincidentes com os resultados de Pinho-da-Cruz [Pinho-da-Cruz 2007]. Por outro lado, os resultados obtidos para os módulos de elasticidade com elementos finitos hexaédricos são ligeiramente inferiores aos obtidos com elementos tetraédricos. Constatou-se, no entanto, que as diferenças são reduzidas, verificando-se que os sucessivos refinamentos de malha com elementos hexaédricos tendem gradualmente para os resultados correspondentes a tetraedros, menos sensíveis a refinamentos de malha na HEA. Este tipo de tendência verifica-se também entre elementos triangulares e quadrangulares. Em termos absolutos, os valores obtidos nos casos 2-D apresentam-se geralmente inferiores aos 3-D. Estas diferenças poder-se-ão dever à consideração de um estado plano de tensão. Esta opção permite a utilização do mesmo tipo de cálculo de propriedades equivalentes, utilizando formas simplificadas das matrizes tridimensionais. No entanto, modelos de EPT tendem para previsões mais flexíveis que os obtidos para a definição 3-D. A utilização de EPT, por conseguinte, aproxima melhor o comportamento de placas finas reforçadas, explicando as diferenças obtidas. O recurso a um EPD, por sua vez, tende usualmente para respostas mais rígidas que os modelos 3-D correspondentes [Böhm 2012]. Considerando os valores obtidos para elementos tetraédricos, os resultados da HEA constituem boas aproximações aos resultados experimentais. As diferenças ao nível dos módulos de Young são reduzidas. Por sua vez, o erro associado aos coeficiente de Poisson  $\nu_{31}$  é mais elevado. No entanto, este facto é coerente com as restantes aproximações.

Os resultados de previsão de propriedades termoelásticas e térmicas do material compósito, por sua vez, são apresentados na tabela 9.4. Estes são aqui comparados com os limites de Voight-

Tabela 9.3: Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo quadrado –, analítica (A) e experimental (E) das propriedades elásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.).

Resultados	$E_{33}$ [GPa]	$E_{11}$ [GPa]	$\nu_{31}$ [-]	$\nu_{12}$ [-]
N — AEH QD4	—	132,4	—	0,209
N — AEH TR3	—	133,9	—	0,209
N — AEH HX8	212,0	141,3	0,195	0,255
N — AEH TT3	214,4	144,5	0,195	0,251
N — Pinho-da-Cruz	214,6	144,5	0,19	0,25
N — Sun e Vaidya (SQR)	215	144	0,19	0,29
N — Sun e Vaidya (HEX)	215	136,5	0,19	0,34
N — Xia <i>et al.</i>	214	143	0,195	0,253
A — Sun e Chen	214	135	0,19	—
A — Chamis	214	156	0,20	0,31
A — Whitney e Riley	215	123	0,19	—
E — Kenaga <i>et al.</i>	216	140	0,29	—

Reuss [Voigt 1889, Reuss 1929] e o modelo de Fahmy e Ragai [Fahmy e Ragai 1970] para o coeficiente de expansibilidade térmica. Este modelo analítico foi desenvolvido para a previsão do comportamento de compósitos de matriz metálica com reforço de partículas. Note-se que a influência das propriedades mecânicas e a consequente geração de tensões de origem térmica entre materiais constituintes leva a que os coeficientes de expansibilidade térmica equivalentes sejam de difícil previsão, divergindo de previsões dadas por leis de misturas como as de Voight-Reuss [Fahmy e Ragai 1970, Gibiansky e Torquato 1997]. Os módulos de condutividade térmica transversal são comparados com os limites superior (sup) e inferior (inf) de Hashin e Shtrikman [Hashin e Shtrikman 1962], para compósitos reforçados com partículas, e com o modelo de previsão de Gutman *et al.* [Gutman *et al.* 1981], desenvolvido com base em teorias de célula unitária para arranjos periódicos de fibras contínuas unidireccionais. Analisando os resultados obtidos, verifica-se antes de mais que os valores obtidos numericamente para a condutividade térmica são muito próximos, especialmente no caso 2-D. Neste caso, a ausência de componentes não-diagonais de condutividade térmica, ao contrário do que ocorre no comportamento elástico com o coeficiente de Poisson, poderá explicar o facto de os resultados dos problemas 2-D de aproximarem dos resultados dos problemas 3-D. Verifica-se que estes valores se encontram aproximadamente dentro dos limites de Voight-Reuss, correspondentes a associações de constituintes em série e em paralelo, respectivamente. Verifica-se ainda que, como esperado, a existência de fases contínuas na direcção longitudinal das fibras leva a que os valores homogeneizados encostem ao limite superior de Voight, para associações em paralelo [Korab *et al.* 2002]. Em termos transversais, por sua vez, os valores obtidos encontram-se dentro dos limites teóricos previstos e muito próximos da previsão de Gutman *et al.* [Gutman *et al.* 1981]. A análise dos coeficientes de expansibilidade térmica é mais complexa. O seu cálculo depende não só das propriedades dos constituintes mas também da matriz de elasticidade homogeneizada. É por esta razão que os valores obtidos para os casos 2-D são bastante diferentes dos 3-D. O facto de se utilizar um modelo de estado plano de tensão leva mais uma vez a uma redução da rigidez do material, reflectindo-se também na sua dilatação efectiva. Note-se que os problemas 3-D resultam em limites que excedem ligeiramente os limites correspondentes de Voight-Reuss. Em contrapartida, os casos 2-D resultam em coeficientes de expansibilidade térmica homogeneizados que diferem em apenas 1,1% da previsão analítica de Fahmy e Ragai, coerente com uma aproximação de EPT a um modelo de previsão que considera partículas de reforço.

As diversas propriedades homogeneizadas apresentadas são calculadas com base nos gradientes dos correctores respectivos. Os campos característicos definidos com base nos correctores constituem uma medida da heterogeneidade microestrutural do material compósito [Chung 1999] e são

Tabela 9.4: Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo quadrado – e analítica (A) de propriedades termoelásticas e térmicas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.).

Resultados	$\alpha_1 [10^{-6}\text{K}^{-1}]$	$\alpha_2 [10^{-6}\text{K}^{-1}]$	$k_{11} [\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}]$	$k_{22} [\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}]$
N — AEH QD4	—	13,88	—	83,07
N — AEH TR3	—	13,88	—	83,72
N — AEH HX8	9,640	16,00	102,0	82,52
N — AEH TT3	9,661	15,99	103,9	84,38
A — Voight (sup)	15,20	15,20	103,5	103,5
A — Reuss (inf)	10,36	10,36	49,38	49,38
A — Fahmy e Ragai	14,04	14,04	—	—
A — HS <sub>sup</sub>	—	—	—	91,75
A — HS <sub>inf</sub>	—	—	—	69,19
A — Gutman	—	—	—	85,90

indicativos da influência das heterogeneidades do material no seu comportamento. São também indicativos da coerência entre as diferentes aplicações da HEA como efectivamente representativas do comportamento do mesmo material. Nas figuras 9.5 e 9.6 apresentam-se os deslocamentos característicos, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva e deslocamentos termocaracterísticos das CRU bi- e tridimensionais, respectivamente. Estes são os resultados de 3 (2-D) e 6 (3-D) sistemas de equações do problema mecânico, 1 sistema de equações do problema termomecânico, e 2 (2-D) e 3 (3-D) sistemas de equações do problema térmico, respectivamente. Cada um corresponde a uma coluna dos correctores  $\chi$ ,  $\Psi$  e  $\Upsilon$ . Cada uma destas colunas é a resposta à coluna correspondente da matriz  $\mathbf{F}^D$ , do vector  $\mathbf{F}^\beta$  e da matriz  $\mathbf{F}^k$ , respectivamente (*vd.* Eqs. 7.32, 7.33 e 7.31). Estes apresentam-se nas figuras 9.7 e 9.8 para os casos bi- e tridimensional, respectivamente.

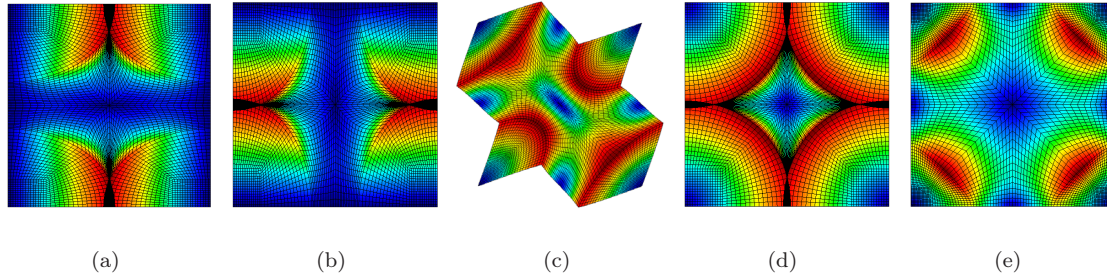


Figura 9.5: Deslocamentos característicos – modos normais (a)  $\chi_{11}$  e (b)  $\chi_{22}$ , e modo de corte (c)  $\chi_{12}$  –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (d)  $\Psi$  – e deslocamentos termocaracterísticos – (e)  $\Upsilon$  – de uma CRU 2-D quadrada discretizada com elementos finitos quadrangulares.

Note-se que a periodicidade dos correctores é perfeitamente garantida, como se pode constatar na figura 9.9. Mostra-se aqui, a título de exemplo, os modos próprios  $\chi_{12}$ , usando uma repetição de 4 CRU em 2-D e 8 CRU em 3-D

Para além do funcionamento geral da HEA, apresentado anteriormente com malhas estruturadas e não-estruturadas, com CRU cúbicas (3-D) e quadradas (2-D), os procedimentos desenvolvidos permitem o processamento de CRU com geometrias paralelepípedicas (3-D) ou rectangulares (2-D). Mostra-se que, desde que representativas da mesma microestrutura, diferentes CRU podem



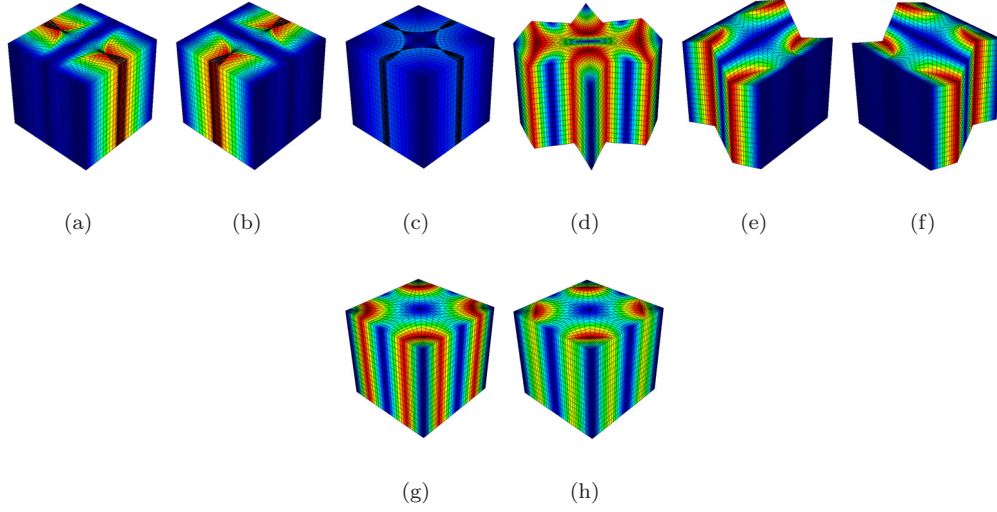


Figura 9.6: Deslocamentos característicos – modos normais (a)  $\chi_{11}$ , (b)  $\chi_{22}$  e (c)  $\chi_{33}$ , e modos de corte (d)  $\chi_{12}$ , (e)  $\chi_{23}$  e (f)  $\chi_{13}$  –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (g)  $\Psi$  – e deslocamentos termocaracterísticos – (h)  $\Upsilon$  – de uma CRU 3-D cúbica discretizada com elementos finitos hexaédricos.

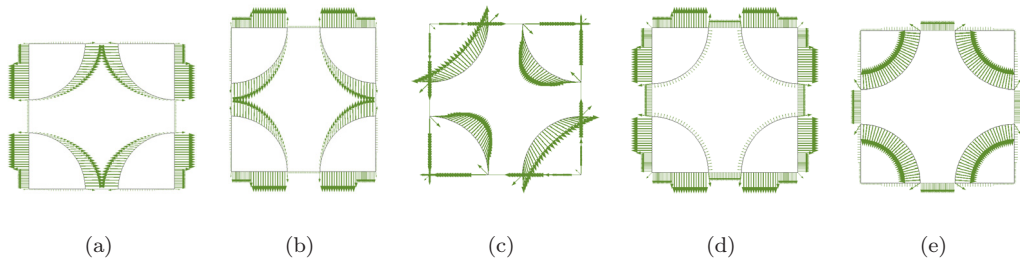


Figura 9.7: Representação vectorial dos campos de solicitações (a-c) mecânicas características,  $\mathbf{F}^D$ , (d) termoelastocaracterística,  $\mathbf{F}^\beta$ , e (e) termocaracterística,  $\mathbf{F}^k$ , de uma CRU 2-D quadrada discretizada com elementos finitos quadrangulares.

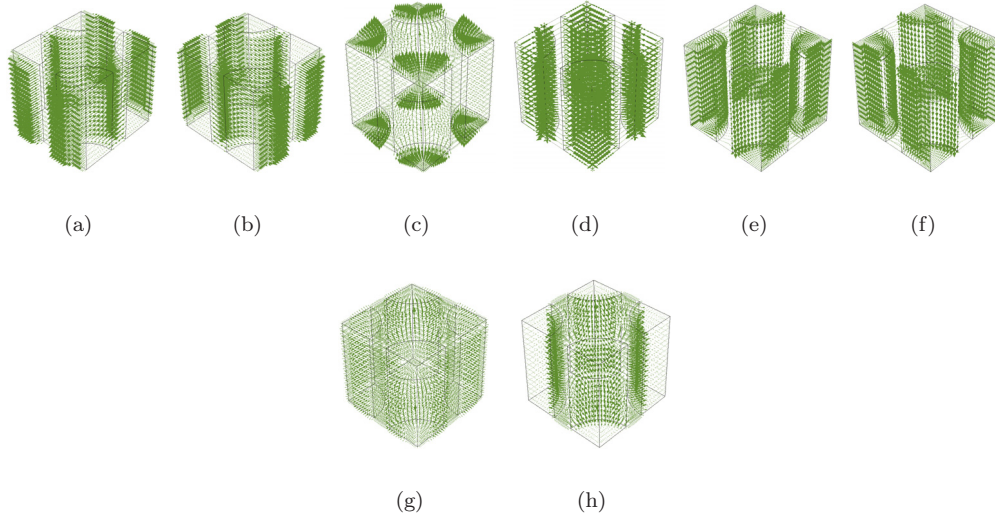


Figura 9.8: Representação vectorial dos campos de solicitações (a-e) mecânicas características,  $\mathbf{F}^D$ , (d) termoelastocaracterística,  $\mathbf{F}^\beta$ , e (e) termocaracterística,  $\mathbf{F}^k$ , de uma CRU 3-D cúbica discretizada com elementos finitos hexaédricos.

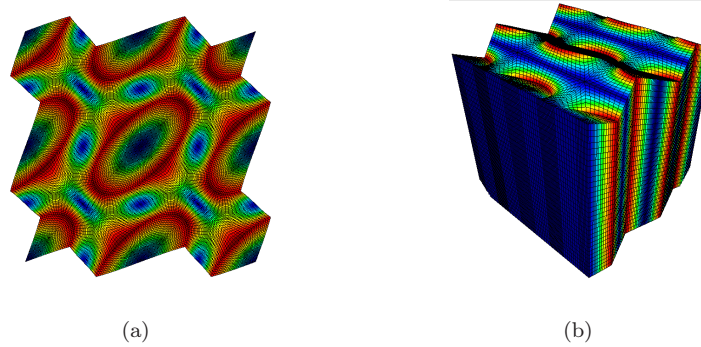


Figura 9.9: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração dos modos de corte (a)  $\chi_{12}$  para uma CRU 2-D e (b)  $\chi_{13}$  para uma CRU 3-D.



ser utilizadas para a obtenção das mesmas propriedades equivalentes [Oliveira *et al.* 2008]. Neste sentido, apresentam-se exemplos de CRU 3-D discretizadas com malhas não-periódicas e não-estruturadas, mas representativas da mesma microestrutura analisada anteriormente (CRU C3T). As geometrias utilizadas apresentam-se nas figuras 9.10, juntamente com uma CRU do problema anterior como referência. Note-se que a CRU C4 tem o dobro das dimensões das outras, sendo equivalente a 8 CRU das anteriores.

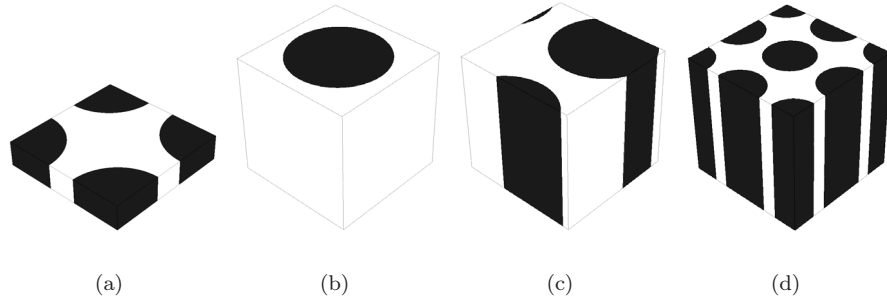


Figura 9.10: Representação de CRU 3-D alternativas para o mesmo arranjo quadrado de fibras contínuas unidireccionais de reforço ( $f_r = 47\%$ ): (a) C1, (b) C2, (c) C3 e (d) C4.

Os resultados obtidos para os problema apresentados resumem-se na tabela 9.5, comparando o erro relativo das normas das matrizes constitutivas calculadas com a HEA relativamente à obtida anteriormente. Aproximações da mesma ordem são obtidas para as diversas componentes das matrizes homogeneizadas, demonstrando que a HEA se apresenta como um método de avaliação de propriedades preciso desde que as CRU sejam representativas do material em análise. Verifica-se ainda que a dimensão característica das heterogeneidades do material, na formulação utilizada, não é relevante. Note-se que, recorrendo apenas a correctores de primeira ordem na HEA, o factor  $\epsilon$  de relação entre escalas não aparece explicitamente na formulação do método. Os resultados apresentados significam também que os procedimentos desenvolvidos são flexíveis o suficiente para processar diferentes tipos de CRU sem perder o seu carácter automático e sem prejuízo da qualidade dos resultados.

Tabela 9.5: Erro absoluto das normas das matrizes constitutivas homogeneizadas em comparação com a CRU de referência (C3T).

RUC	C1	C2	C3	C4
Erro $\ \mathbf{D}^h\ $ [%]	0,09	0,23	0,00	0,19
Erro $\ \boldsymbol{\beta}^h\ $ [%]	0,67	0,35	0,17	0,18
Erro $\ \mathbf{k}^h\ $ [%]	0,00	0,02	0,01	1,08

Mostram-se na figura 9.11 ilustrações de periodicidade, utilizando 4 CRU. Estas são indicativas de que os correctores obtidos são representativos das mesmas heterogeneidades do material, apesar de resultarem de unidades representativas diferentes.

### 9.2.2 Células Representativas Unitárias Hexagonais

Na sequência dos resultados anteriores, pretende-se aqui ilustrar a flexibilidade desta implementação do método da homogeneização por expansão assimptótica na utilização de células representativas unitárias menos comuns. Neste sentido, desenvolveram-se módulos de avaliação de malha,

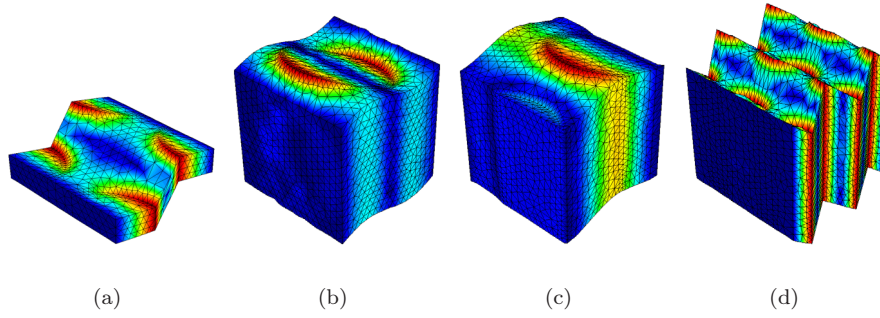


Figura 9.11: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração do modos de corte  $\chi_{13}$ , para as CRU alternativas (a) C1, (b) C2, (c) C3 e (d) C4.

associação de graus de liberdade e geração automática de condições de fronteira para permitir a utilização de CRU do tipo prisma hexagonal regular (3-D) ou hexagonais (2-D), para além das CRU cúbicas ou paralelepípedicas apresentadas anteriormente [Oliveira *et al.* 2009b]. Para o efeito, analisa-se novamente um material compósito de alumínio reforçado com fibras unidireccionais de boro ( $f_r = 0,47$ ). As propriedades são as apresentadas anteriormente na tabela 9.2. A distribuição de reforço, no entanto, segue um arranjo hexagonal em vez do arranjo quadrangular apresentado. Esta é representada na figura 9.12, onde se podem ver também as CRU alternativas utilizadas, com bases quer hexagonais quer rectangulares [Oliveira *et al.* 2009b].

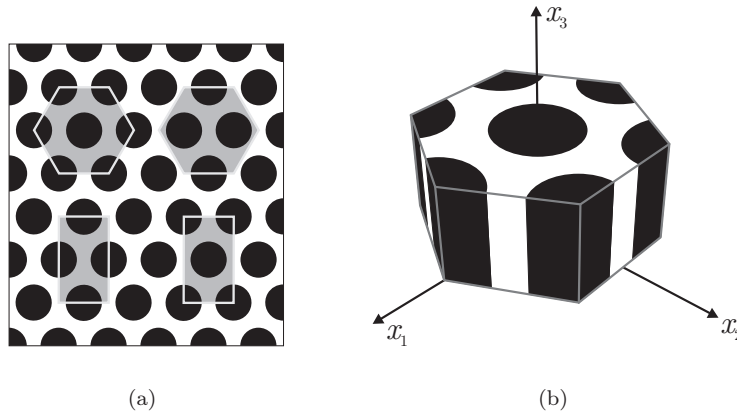


Figura 9.12: Representação (a) de células representativas unitárias alternativas para a microestrutura de um material compósito com arranjo hexagonal de fibras contínuas unidireccionais de reforço e (b) da CRU prismática hexagonal regular utilizada.

Utilizam-se novamente malhas estruturadas periódicas e não-estruturadas não-periódicas, bi- e tridimensionais. Opta-se por apresentar apenas dois tipos de CRU, ilustrando-se nas figuras 9.13 exemplos de malhas regulares utilizadas. Estas foram geradas respeitando análises de convergência de malha [Rizzo 1991]. Neste sentido, utilizaram-se malhas de 7494 triângulos (H2T) e 5760 quadriláteros (H2Q) em CRU 2-D hexagonais, 6142 triângulos (P2T) e 6200 quadriláteros (P2Q) em CRU 2-D rectangulares, 22141 tetraedros (H3T) e 22500 hexaedros (H3H) em CRU 3-D prismáticas hexagonais regulares, 14583 tetraedros (P3T) e 15500 hexaedros (P3H) em CRU 3-D paralelepípedicas.

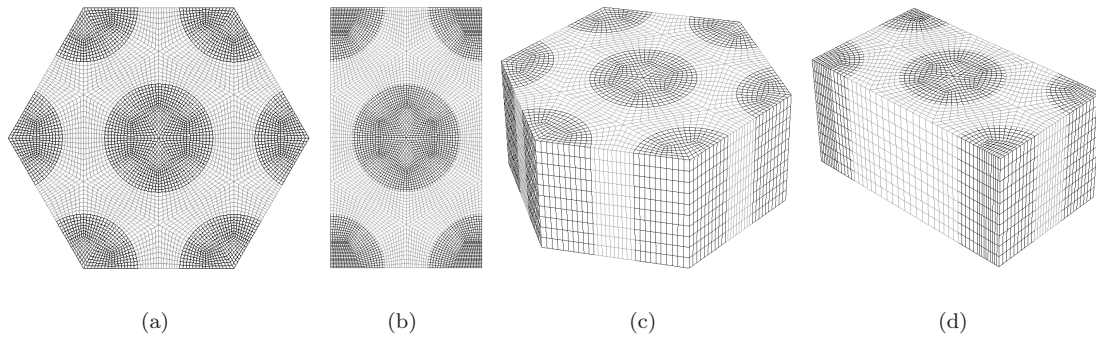


Figura 9.13: Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise. Ilustração de células representativas unitárias: (a) hexagonal, (b) rectangular, (c) prismática hexagonal regular e (d) paralelepipedica, discretizadas com malhas regulares de (a,b) quadriláteros e (c,d) hexaedros.

Os resultados obtidos revelam um comportamento do tipo ortotrópico. Adicionalmente, de modo coerente com o tipo de microestrutura estudada, verifica-se que a matriz de elasticidade corresponde ao caso particular de comportamento ortotrópico em que não existe dependência da orientação no plano ortogonal à direcção longitudinal das fibras (*vd.* Fig. 9.4). Assim, o material apresenta um comportamento transversalmente isotrópico, também chamado de hexagonal [Mavko *et al.* 1998, Dowling 1999, Rand e Rovenski 2005]. A matriz de flexibilidade homogeneizada mantém a forma apresentada na equação 9.2, mas, neste caso, com apenas duas propriedades independentes no plano de isotropia ( $\nu_{12}$  e  $E_{11}$ ).

Na tabela 9.6 mostram-se as propriedades elásticas homogeneizadas – módulos de elasticidade longitudinal e transversal, e coeficientes de Poisson associados – obtidas com as diferentes discretizações. Mostram-se resultados numéricos de HEA para problemas 2-D e 3-D, com distribuições hexagonais de reforço. Estes valores são comparados com outros resultados de previsão numérica (N) e analítica (A), assim como com resultados experimentais (E) [Kenaga *et al.* 1987]. Verifica-se que os valores obtidos para diferentes geometrias de célula representativa unitária são muito aproximados. As propriedades elásticas calculadas têm, no entanto, algumas diferenças. No que diz respeito ao módulo de elasticidade longitudinal,  $E_{33}$ , verifica-se que os valores obtidos são inferiores, ainda que com diferenças reduzidas, ao valor estimado para arranjos quadrados e para os valores experimentais (*vd.* Tab. 9.3). Os valores do módulo de elasticidade transversal,  $E_{11}$ , são mais baixos que os resultados obtidos para arranjos quadrados [Huang *et al.* 2008], tal como mostram os valores obtidos por Sun e Vaidya [Sun e Vaidya 1996]. Este facto deve-se ao tipo de comportamento do material, tetragonal no caso dos arranjos quadrados e transversalmente isotrópico no arranjo hexagonal. Neste caso, a diferença para os valores experimentais é de 4,4%. Mais uma vez, os valores obtidos para os coeficientes de Poisson apresentam diferenças superiores. O coeficiente de Poisson longitudinal-transversal ( $\nu_{31}$ ) apresenta valores semelhantes às restantes previsões. Verifica-se, no entanto, que as previsões do coeficiente de Poisson transversal-transversal ( $\nu_{12}$ ) tendem para valores superiores aos limites numéricos dos coeficientes correspondentes dos materiais constituintes [Huang *et al.* 2008], tendência apresentada também pelos resultados de Sun e Vaidya [Sun e Vaidya 1996]. Nos casos 2-D isto não acontece, porém, são claramente superiores aos correspondentes a arranjos 2-D quadrados. Verifica-se ainda que as CRU 2-D rectangulares (P2Q e P2T) resultam em módulos de elasticidade transversais inferiores a qualquer um dos casos estudados. Note-se que, à semelhança dos estudos anteriores e com a excepção do módulo de elasticidade longitudinal do problema P3T, as malhas não-estruturadas tendem a resultar em respostas mais rígidas que as malhas estruturadas, tanto em problemas bi- quanto tridimensio-

nais. Refira-se ainda que as diferenças entre os resultados da HEA, para ambos os arranjos de fibras reforço, e os experimentais, podem advir do facto da modelação numérica não contemplar a distribuição irregular das fibras de reforço, factor que influencia maioritariamente as propriedades transversais. Adicionalmente, factores como defeitos microestruturais ou questões de aderência entre constituintes acentuam estas diferenças [Pinho-da-Cruz 2007].

Tabela 9.6: Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo hexagonal –, analítica (A) e experimental (E) das propriedades elásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.).

Resultados	$E_{33}$ [GPa]	$E_{11}$ [GPa]	$\nu_{31}$ [-]	$\nu_{12}$ [-]
N — H2Q	—	130,9	—	0,252
N — H2T	—	133,8	—	0,251
N — P2Q	—	125,0	—	0,257
N — P2T	—	125,4	—	0,257
N — H3H	210,1	130,0	0,195	0,310
N — H3T	212,4	133,9	0,195	0,302
N — P3H	215,3	133,1	0,195	0,310
N — P3T	213,1	134,3	0,195	0,301
N — Sun e Vaidya (SQR)	215	144	0,19	0,29
N — Sun e Vaidya (HEX)	215	136,5	0,19	0,34
N — Xia <i>et al.</i>	214	143	0,195	0,253
A — Sun e Chen	214	135	0,19	—
A — Chamis	214	156	0,20	0,31
A — Whitney e Riley	215	123	0,19	—
E — Kenaga <i>et al.</i>	216	140	0,29	—

Por sua vez, propriedades termoelásticas e térmicas homogeneizadas são apresentadas na tabela 9.7. Neste caso, os valores obtidos para as diversas propriedades efectivas são muito próximas dos obtidos para arranjos quadrados, verificando-se assim que a alteração para um arranjo hexagonal de fibras tem pouca influência nas propriedades obtidas. Isto deve-se ao facto de se continuar a ter uma fase contínua de matriz com uma distribuição regular de reforço, o que acaba por se traduzir numa aproximação entre comportamento tetragonal e transversalmente isotrópico em propriedades sem componentes não-diagonais.

À semelhança do apresentado anteriormente, as propriedades homogeneizadas são calculadas com base nos gradientes dos correctores  $\chi$ ,  $\Psi$  e  $\Upsilon$ . Estes são ilustrados nas figuras 9.14 e 9.15 para os casos 2-D e 3-D, respectivamente. Note-se que correspondem aos mesmos modos próprios, mostrando que, apesar de se utilizarem CRU diferentes e arranjos diferentes, traduzem de forma equivalente as heterogeneidades do material.

Ilustra-se ainda a periodicidade das CRU hexagonal e prismática hexagonal regular na figura 9.16. Representam-se aqui os modos de cortes  $\chi_{13}$  para arranjos de 4 (2-D) e 8 (3-D) células vizinhas e discretizações com elementos finitos quadriláteros e hexaédricos, respectivamente.

### 9.2.3 Cálculo Multiescala e Localização

Apresenta-se ainda, a título de exemplo, um problema geral de termoelasticidade multiescala com recurso à homogeneização por expansão assintótica. O objectivo dos resultados apresentados é ilustrar o procedimento de localização, usualmente pouco abordado e representando uma das grandes vantagens da HEA. Representa-se esquematicamente na figura 9.17 o problema resolvido para os casos 2-D e 3-D. São aqui impostas restrições de temperatura ( $\bar{T} = T_{\text{ref}} = 298 \text{ K}$ ) nas paredes laterais e prescritos fluxos superficiais de calor por condução na direcção normal. Na discretização do problema macroestrutural utilizaram-se malhas estruturadas de 2500 elementos quadriláteros e

Tabela 9.7: Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo hexagonal – e analítica (A) de propriedades termoelásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais contínuas de boro (47% vol.).

Resultados	$\alpha_1$ [ $10^{-6}\text{K}^{-1}$ ]	$\alpha_2$ [ $10^{-6}\text{K}^{-1}$ ]	$k_{11}$ [ $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ]	$k_{22}$ [ $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ]
N — H2Q	—	14,15	—	82,82
N — H2T	—	14,14	—	84,29
N — P2H	—	13,92	—	84,37
N — P2T	—	13,90	—	84,23
N — H3H	9,631	16,05	101,6	82,66
N — H3T	9,705	16,03	104,2	85,57
N — P3H	9,631	16,05	104,1	84,68
N — P3T	9,669	16,02	104,2	85,55
A — Voight (sup)	15,20	15,20	103,5	103,5
A — Reuss (inf)	10,36	10,36	49,38	49,38
A — Fahmy e Ragai	14,04	14,04	—	—
A — HS <sub>sup</sub>	—	—	—	91,75
A — HS <sub>sup</sub>	—	—	—	69,19
A — Gutman	—	—	—	85,90

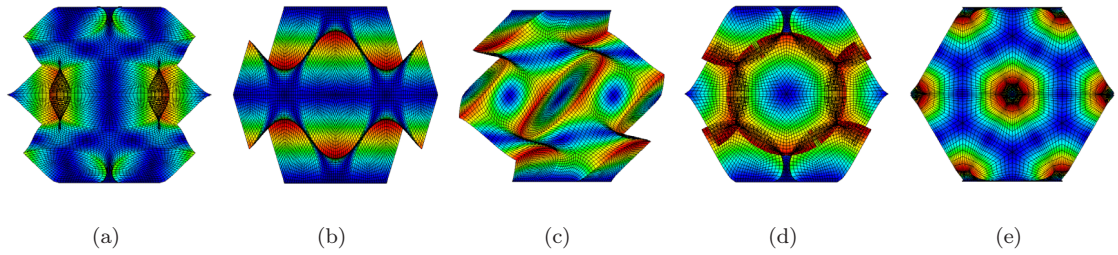


Figura 9.14: Deslocamentos característicos – modos normais (a)  $\chi_{11}$  e (b)  $\chi_{22}$ , e modo de corte (c)  $\chi_{12}$  –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (d)  $\Psi$  – e deslocamentos termocaracterísticos – (e)  $\Upsilon$  – de uma CRU 2-D hexagonal discretizada com elementos finitos quadrangulares.

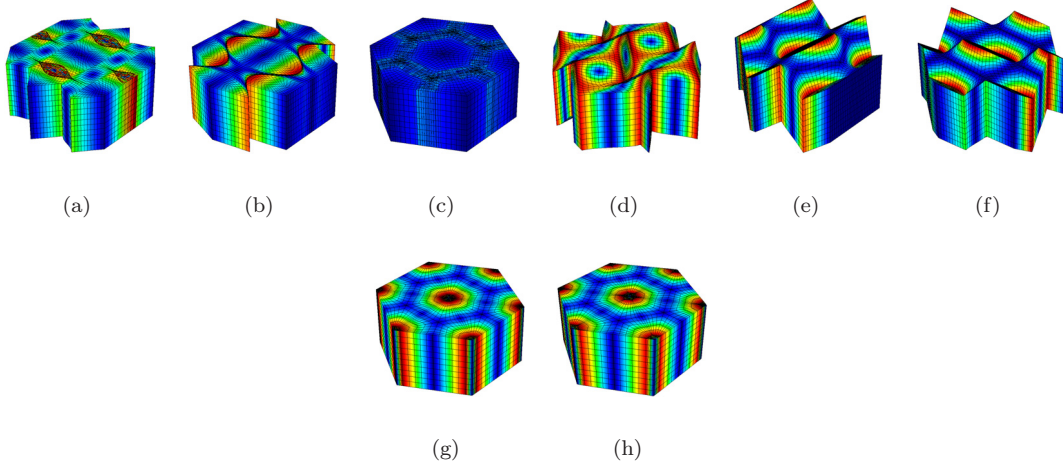


Figura 9.15: Deslocamentos característicos – modos normais (a)  $\chi_{11}$ , (b)  $\chi_{22}$  e (c)  $\chi_{33}$  e modos de corte (d)  $\chi_{12}$ , (e)  $\chi_{23}$  e (f)  $\chi_{13}$  –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (g)  $\Psi$  – e deslocamentos termocaracterísticos – (h)  $\Upsilon$  – de uma CRU 3-D hexagonal discretizada com elementos finitos hexaédricos.

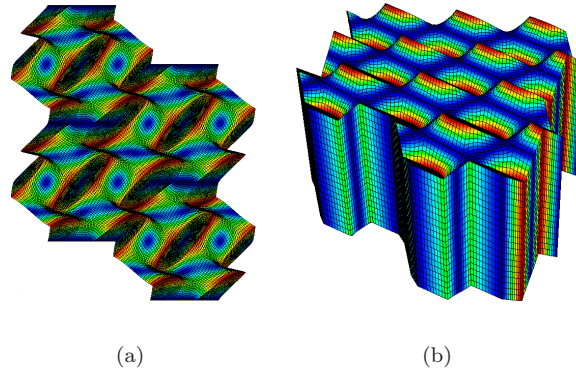


Figura 9.16: Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração dos modos de corte (a)  $\chi_{12}$  para uma CRU hexagonal (2-D) e (b)  $\chi_{13}$  para uma CRU prismática hexagonal regular (3-D).



5488 elementos hexaédricos para os problemas bi- e tridimensionais, respectivamente. As células representativas unitárias utilizadas são as apresentadas nas secções anteriores.

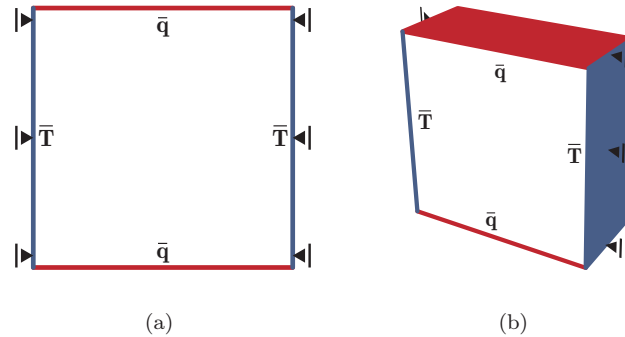
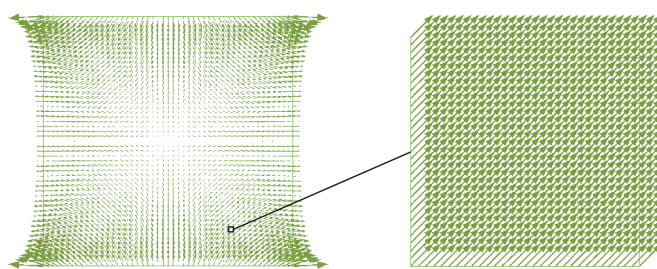


Figura 9.17: Representação esquemática de um problema de termoelasticidade. Definição (a) bi- e (b) tridimensional.

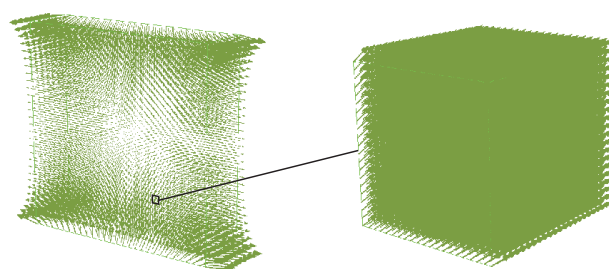
O método de HEA fornece equações explícitas para a determinação dos níveis microestruturais de fluxo superficial de calor por condução, de tensão e de deformação. Estas equações sobrepõem aos campos macroestruturais (homogêneos) as oscilações induzidas pelas heterogeneidades microestruturais. Note-se que, como se ilustra na figura 9.18 para os campos vectoriais de fluxo superficial de calor por condução de um elemento da macroescala, se o material de base é homogêneo, os resultados da localização deverão ser idênticos aos campos homogêneos macroestruturais. Verifica-se neste caso que os campos localizados correspondem a uma distribuição homogênea do campo macroestrutural. No entanto, quando a estrutura é constituída por um material heterogêneo, os campos macroestruturais são na realidade campos médios (homogeneizados) dos campos reais heterogêneos, obtidos por localização. Neste contexto, mostram-se nas figuras 9.19 a 9.22 resultados de localização obtidos com a resolução do problema multiescala termoelástico, para problemas 2-D e 3-D, com arranjos quadrados e hexagonais de reforço. A localização é feita em dois elementos exemplificativos, a partir de um dos pontos de integração, de modo a ilustrar a coerência dimensional e direccional dos campos localizados com os campos macroestruturais. Os campos apresentados são referentes à tensão equivalente e aos fluxos superficiais de calor por condução, neste caso também com representação dos campos vectoriais.

Verifica-se em qualquer dos casos que os campos localizados têm valores superiores no constituinte com a propriedade equivalente mais elevada. Assim, a localização de uma dada deformação macroestrutural resulta em tensões mais elevadas no constituinte mais rígido. Da mesma forma, a um determinado campo de temperaturas macroestrutural corresponde um campo de fluxos de calor que são superiores no constituinte com maior coeficiente de condutividade térmica. As diferenças de magnitude destes campos são reguladas pela diferença entre as respectivas propriedades, traduzidas nos respectivos correctores. Verifica-se também que a média volúmica dos campos localizados, ponderada com as propriedades dos constituintes, corresponde ao valor associado ao elemento macroestrutural utilizado na localização.

Refira-se que o processo de localização permite a avaliação do comportamento do material compósito em regimes não-lineares. No entanto, a saída de regimes lineares tem como consequência a obrigatoriedade de um estudo individualizado para cada ponto de integração da macroescala, usualmente aproximado com avaliação média de cada elemento finito. Este estudo individualizado obriga à localização para todos os elementos macroestruturais, assim como, a partir do momento em que se abandona o regime de comportamento linear, ao estudo de comportamento e homogeneização do material compósito em cada elemento. À semelhança do que acontece com os problemas de optimização topológica multiescala abordados neste trabalho, os requisitos computacionais crescem



(a)



(b)

Figura 9.18: Representação vectorial dos campos de fluxo superficial de calor por condução, com localização na microescala correspondente a um dos elementos macroestruturais. Exemplos de material homogêneo (a) bi- e (b) tridimensional.



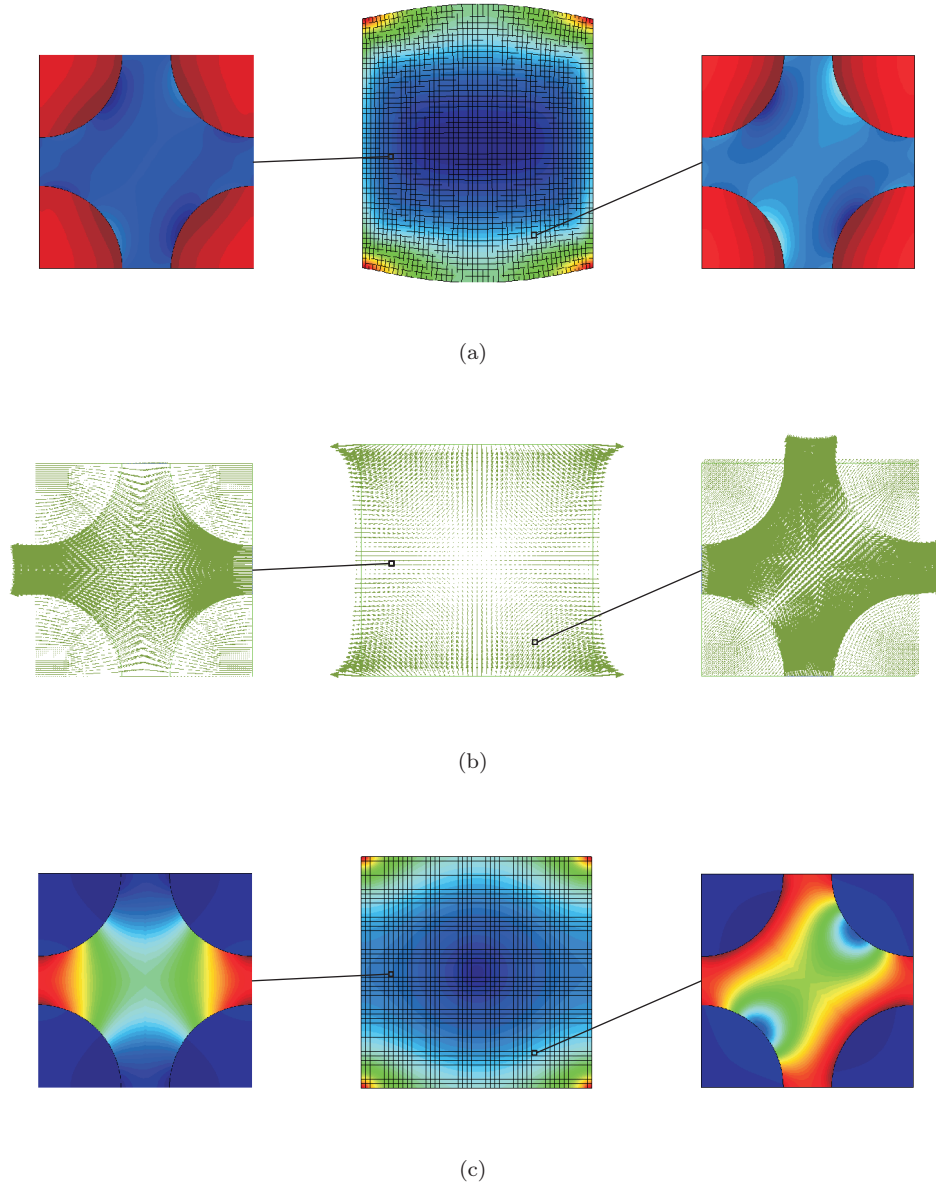
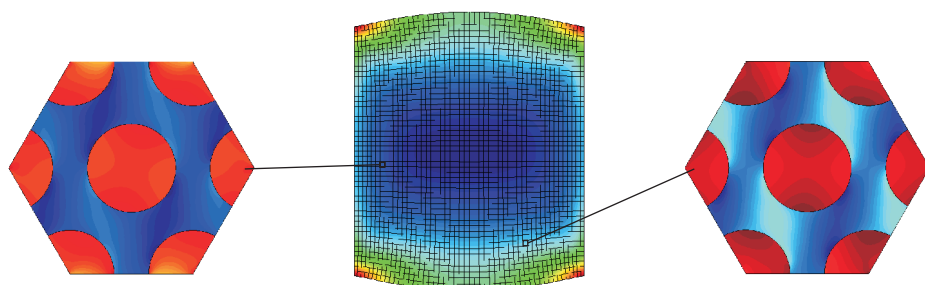
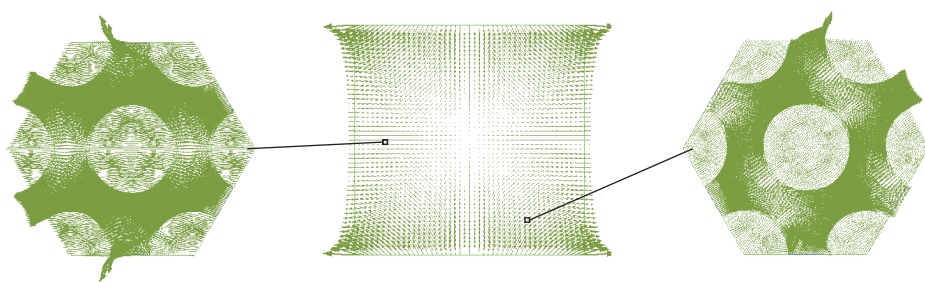


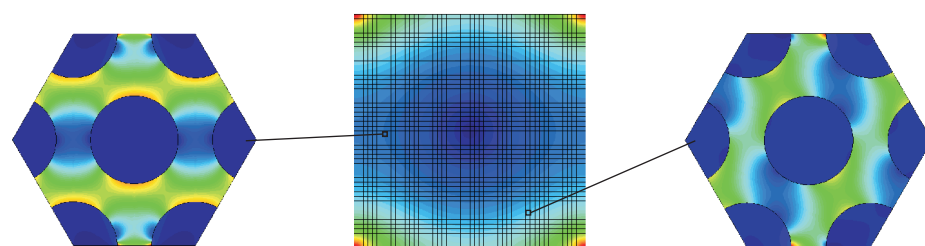
Figura 9.19: Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 2-D de CRU quadradas: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução.



(a)

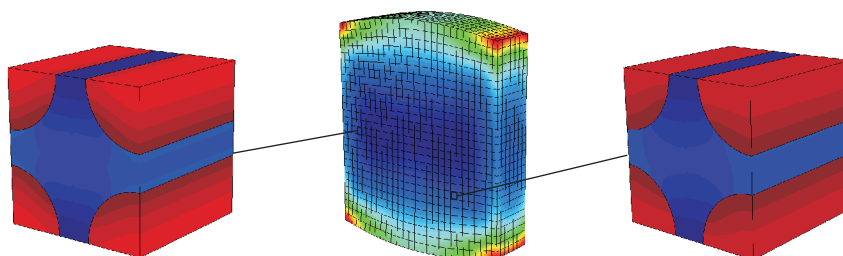


(b)

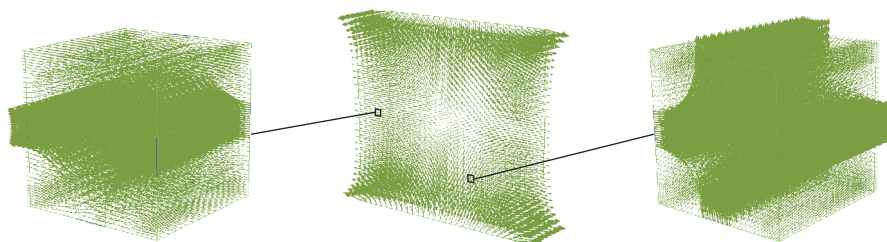


(c)

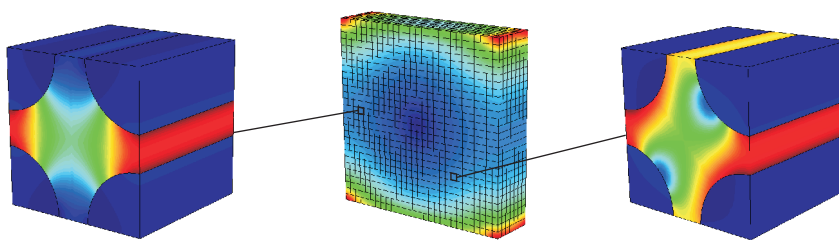
Figura 9.20: Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 2-D de CRU hexagonais: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução.



(a)

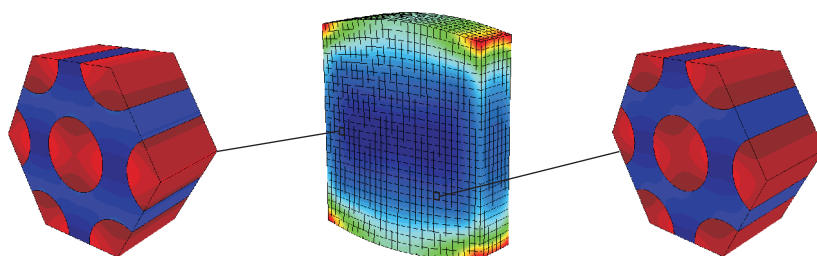


(b)

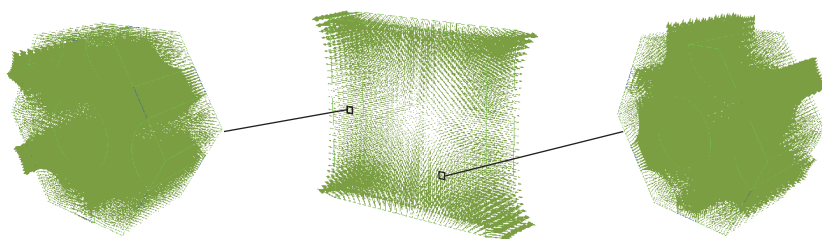


(c)

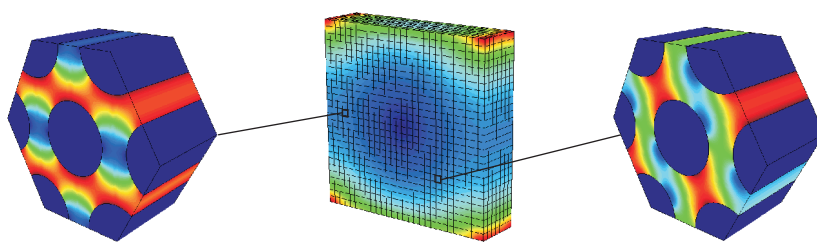
Figura 9.21: Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 3-D de CRU cúbicas: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução.



(a)



(b)



(c)

Figura 9.22: Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 3-D de CRU prismáticas hexagonais regulares: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução.

para níveis muitas vezes proibitivos, razão pela qual a aplicação da HEA a regimes não-lineares é pouco comum [Terada 1996].

### 9.3 Optimização Topológica

Ao longo desta secção opta-se por abordar diversos aspectos da optimização topológica com base num problema bidimensional comum. Desta forma, validam-se os procedimentos gerais implementados e analisam-se vários fenómenos e parâmetros de configuração de modo mais perceptível e melhor ilustrado. O principal problema abordado é a viga “MBB” [Rozvany 1998, Bendsøe e Sigmund 2003], cuja definição geral é ilustrada na figura 9.23. Este problema teve origem na empresa Messerschmidt-Bälkew-Blohm e diz respeito a uma peça de um avião de passageiros Airbus com diversas restrições [Olhoff e Bendsøe 1991, Rozvany 1998]. A designação de viga MBB designa habitualmente um problema com as mesmas condições de fronteira e um objectivo de minimização de *compliance*. Resultados de optimização topológica com base neste problema podem ser consultados em diversas referências [Haber *et al.* 1996, Rozvany 1998, Hassani e Hinton 1999, Rodrigues *et al.* 2002, Bendsøe e Sigmund 2003, Sigmund 2007, Rozvany 2009, Groenwold e Etman 2009, Sigmund 2009, Andreassen *et al.* 2010]. Apresentam-se ainda, a título de exemplo, alguns problemas tridimensionais.

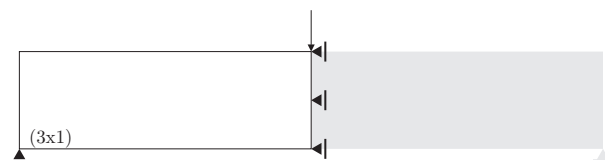


Figura 9.23: Representação esquemática do problema de optimização topológica MBB, considerando condições de fronteira de simetria.

Chama-se a atenção para o facto de os estudos apresentados nesta secção serem independentes da magnitude das solicitações ou do material de base. Tendo os materiais utilizados comportamento linear, a optimização é controlada pelas sensibilidades elementares, sendo estas proporcionais às solicitações impostas. Desde que dentro dos limites implementados de actuação dos métodos de optimização utilizados, o facto das sensibilidades manterem variações relativas idênticas entre problemas cujas condições de fronteira variem apenas em magnitude leva a que a topologia óptima seja invariante. Neste sentido, os problemas resolvidos neste trabalho são normalizados com base nos valores iniciais das funções-objectivo (*vd.* Eq. 5.9). Utiliza-se como material de base um material isotrópico cujas propriedades são ilustradas na tabela 9.8. As solicitações impostas, por sua vez, podem ser usualmente consideradas como sendo unitárias.

Tabela 9.8: Propriedades termoelásticas e térmicas de um material isotrópico genérico.

Propriedade	Valor
Módulo de elasticidade, $E_m$ [GPa]	200,0
Coefficiente de Poisson, $\nu_m$ [-]	0,3
Coefficiente de condutividade térmica, $k_m$ [Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	46
Coefficiente de expansibilidade térmica, $\alpha_m$ [K <sup>-1</sup> ]	$1,0 \times 10^{-5}$

Salienta-se o facto de a verificação numérica das soluções obtidas por métodos de optimização topológica, nomeadamente na utilização do SIMP, ser usualmente complexa. O método mais usual de verificação consiste na comparação visual entre soluções, altamente subjectivo, mas muitas vezes com poucas alternativas [Rozvany 2009]. Por um lado, existem de uma grande variedade de

parâmetros e abordagens a influenciar os resultados. Note-se que mesmo as metodologias usualmente utilizadas para melhorar o comportamento numérico dos procedimentos computacionais são muitas vezes responsáveis pela variedade de soluções obtidas (*e.g.* filtros de independência de malha). Por outro lado, a comparação com *benchmarks* analíticos, especialmente estruturas de Michell reveste-se de problemas [Rozvany 1998, Lewiński e Rozvany 2007, Lewiński e Rozvany 2008, Rozvany 2009]. Atendendo ao exposto, mantendo a observação formal como modo de avaliação de resultados, analisa-se e compara-se também o impacto de cada metodologia nos resultados efectivos do processo de optimização, ao nível da função-objectivo ou de algumas variáveis notáveis.

### 9.3.1 Estudos Gerais

Na resolução do problema MBB utilizam-se malhas estruturadas de quadriláteros, com  $15 \times 5$  (M1),  $30 \times 10$  (M2),  $60 \times 20$  (M3),  $120 \times 40$  (M4) e  $240 \times 80$  (M5) elementos finitos (*vd.* Fig. 9.24). Este problema é resolvido com uma restrição de volume de  $f_v = 0,5$ , utilizando um método de optimização de Critério de Óptimo (*Optimality Criteria* – OC). Considera-se uma associação de material/vazio, com uma densidade mínima  $\rho_{\min} = 0,001$ . O modelo de interpolação material é o SIMP (*vd.* Sec. 5.3), com uma penalidade  $p = 3,0$ . Sem qualquer técnica de controlo de instabilidades numéricas, as topologias óptimas obtidas para cada discretização são ilustradas na figura 9.25.

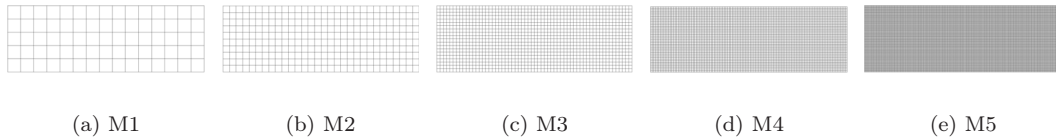


Figura 9.24: Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise do problema de optimização topológica MBB, discretizadas com (a)  $15 \times 5$ , (b)  $30 \times 10$ , (c)  $60 \times 20$ , (d)  $120 \times 40$  e (e)  $240 \times 80$  elementos finitos quadriláteros.

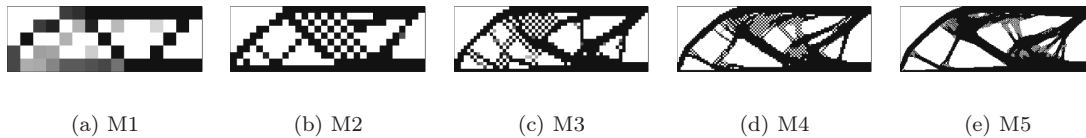
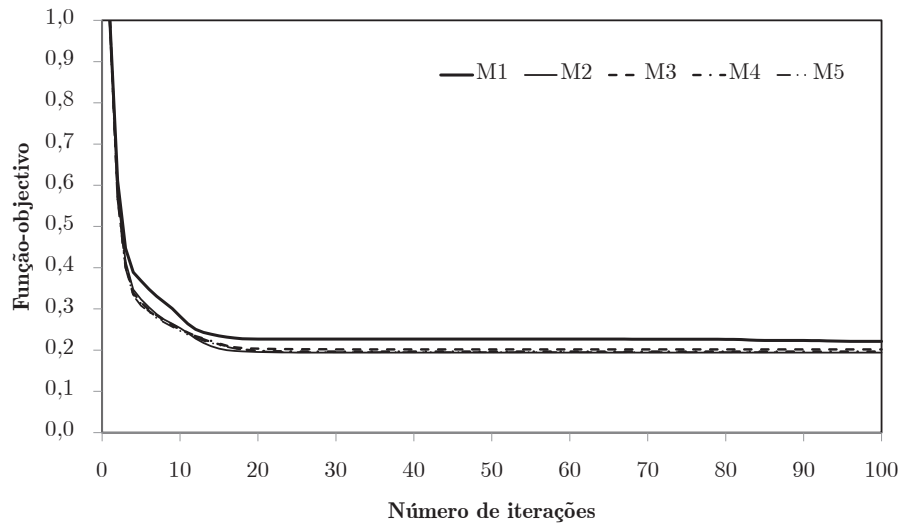
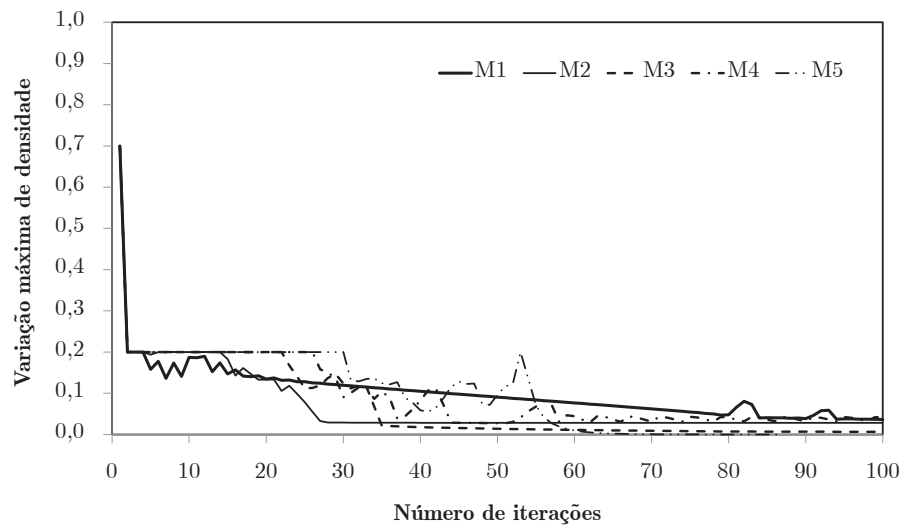


Figura 9.25: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método OC sem filtragem.

Na figura 9.26 mostra-se a evolução das funções-objectivo e a variação máxima de densidade por iteração ao longo do processo iterativo. Utilizaram-se critérios de paragem apertados, com tolerâncias de  $10^{-5}$  e um número máximo de iterações de 100. Verifica-se uma rápida e estável convergência para as topologias apresentadas. A restrição de volume é sempre respeitada, definida como restrição de igualdade. A optimização com diferentes malhas de elementos finitos converge para soluções com funções-objectivo normalizadas muito próximas. Isto deve-se à influência do problemas de *checkerboard*. A rigidez excessiva originada por este fenómeno com elementos finitos lineares leva a um aumento artificial da rigidez da estrutura e conseqüente redução da energia de deformação. Uma malha mais grosseira de elementos de dimensões superiores reduz a qualidade da aproximação e tende a reduzir a flexibilidade da estrutura, mesmo sem *checkerboards* [Rozvany 2009]. Por esta razão, os valores iniciais absolutos das funções-objectivo, calculados para uma densidade constante, tendem a aumentar com o refinamento de malha. Neste caso, corresponde



(a)



(b)

Figura 9.26: Problema de optimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resolvido com um método de critério de óptimo e sem técnicas de controlo de instabilidades: evolução (a) da função-objectivo e (b) da actualização de densidade máxima.



a subidas entre 3,3% no primeiro refinamento e 1,8% no último. Salienta-se ainda a influência do limite móvel no OC, impedindo que as actualizações de densidades excedam o valor definido ( $\zeta = 0,2$ ).

### 9.3.1.1 SIMP e Implicações Numéricas

A resolução geral ilustrada anteriormente apresenta alguns dos problemas de instabilidade numérica apresentados na Secção 5.4. Um dos primeiros problemas de instabilidade a abordar é a questão dos fenómenos de *checkerboard*. Estes são fenómenos numéricos originados pela resposta de alguns elementos finitos utilizados, levando a um aumento artificial de rigidez com este tipo de distribuição de material [Rozvany 2009]. Este problema pode resolver-se com técnicas de filtragem. Neste trabalho utilizam-se preferencialmente filtros de conectividade<sup>3</sup>. Por um lado, evitam a possibilidade de se afectarem regiões próximas sem ligação de material. Por outro lado, apesar de exigirem algum processamento adicional, permitem um controlo de malha mais rigoroso. O tipo de filtro com conectividade mais elementar corresponde à consideração de apenas uma camada de elementos em torno de cada elemento finito (filtro F2).

Utilizando um raio relativo de  $\bar{R}_f = 1,25$ , resolve-se a questão do *checkerboard* com um mínimo de perda de detalhe nas soluções. Neste caso, considerando-se apenas uma camada de elementos vizinhos, a vizinhança definida na equação 5.28 depende das conectividades e não apenas do raio. O raio é utilizado para controlar o peso relativo das densidades vizinhas na ponderação do filtro. Considera-se raio 1 como a distância até ao vizinho mais próximo. Em malhas regulares de quadriláteros ou hexaedros, por exemplo, um raio próximo da unidade acaba por incluir apenas elementos vizinhos com conectividade de arestas. Os resultados obtidos com o OC são apresentados na figura 9.27. Verifica-se em primeiro lugar o aparecimento de regiões de densidade intermédia, correspondentes a transições entre zonas de material e zonas de vazio. Mostra-se também que desapareceram os problemas de checkerboard observados anteriormente, constatando-se o correcto funcionamento do filtro de sensibilidades. Por outro lado, constata-se que este filtro não garante independência de malha. Na realidade, o facto de incluir apenas uma camada de elementos vizinhos leva a que se permita detalhe adicional com o refinar da malha de elementos finitos.

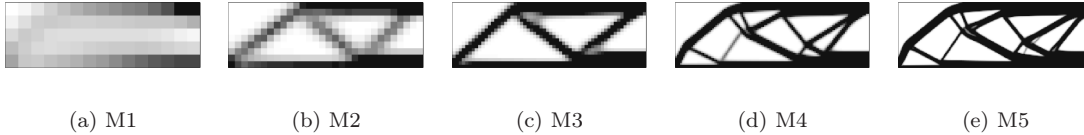


Figura 9.27: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método OC com um filtro de sensibilidade (F2,  $\bar{R}_f = 1,25$ ).

Este efeito tem impacto efectivo no objectivo a otimizar. Como se pode ver na figura 9.28, onde se mostra a evolução da função-objectivo para cada uma das discretizações utilizadas, existem diferenças evidentes entre os mínimos obtidos para os diferentes casos. Aparentemente a minimização é menos eficiente para malhas mais grosseiras. Isto deve-se a dois factores. Por um lado, o detalhe adicional referido anteriormente permite um número maior de elementos estruturais com o refinamento da malha. Os sucessivos refinamentos tendem a gerar um número crescente de elementos estruturais, convergindo gradualmente para uma solução próxima da solução analítica de Michell (*e.g.* Fig. 9.29) [Rozvany 1998]. Por outro lado, os casos anteriores sofrem dos referidos problemas de rigidez artificial. Note-se ainda que o caso particular da malha M1 tende a ser demasiado grosseira para a utilização de técnicas de filtragem, faltando resolução para a geração de

<sup>3</sup>Classificam-se aqui filtros de conectividade como filtros de sensibilidades (ou de densidades) que definem as fronteiras dos elementos não só pela sua localização espacial mas também pela sua conectividade efectiva.



ligações estruturais efectivas. O facto de as regiões de densidades intermédias serem penalizadas leva a que a sua rigidez efectiva seja exponencialmente reduzida face às regiões de material.

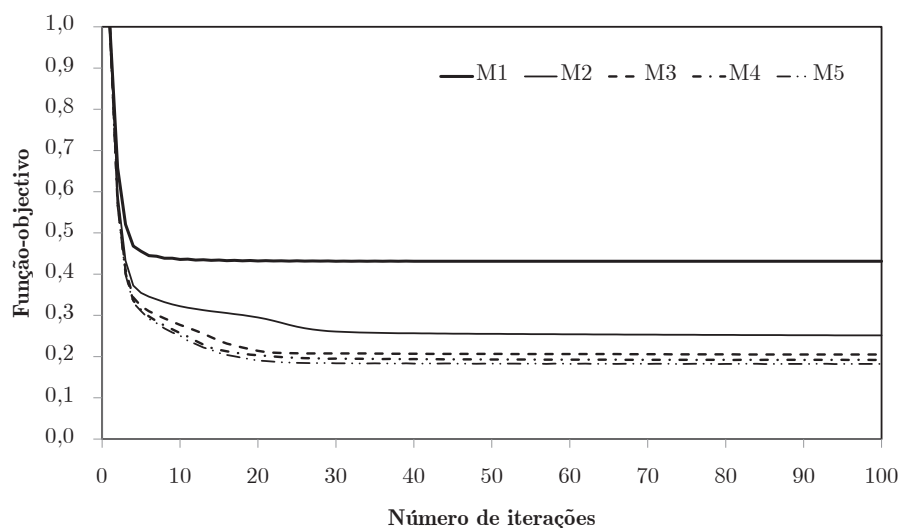


Figura 9.28: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resolvido com um método de critério de óptimo e um filtro de sensibilidades F2, com  $\bar{R} = 1,25$ .

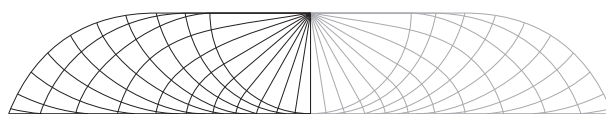


Figura 9.29: Exemplo de solução de Michell para o problema MBB [Rozvany 1998].

Comparando métodos de resolução, a resolução do mesmo problema com o Método das Assíptotas Móveis (MMA) conduz às topologias apresentadas na figura 9.30. A principal diferença surge na malha M4, onde neste caso se perde algum detalhe comparativamente aos resultados do OC. Contudo, estas topologias são coincidentes com as topologias obtidas com OC quando se aumentando o raio do filtro para  $\bar{R}_f = 2,5$ . Constata-se que o MMA é menos sensível à variação do raio, ao mesmo tempo que o OC apenas apresenta pequenas diferenças relativamente a este para raios muito reduzidos. Ainda assim, entre qualquer uma destas soluções, as diferenças em termos de função-objectivo do caso M4 são inferiores a 0,5%. Este comportamento do MMA relaciona-se com o facto de o método contabilizar não só valores isolados de sensibilidade mas também os das soluções anteriores, tendendo a eliminar mais rapidamente regiões de oscilação em densidades intermédias ou elementos estruturais de reduzida espessura e densidade. As funções-objectivo para a resolução do problema M4 (filtro F2 com raio  $\bar{R}_f = 1,25$ ) são comparadas na figura 9.31, considerando o método OC, MMA geral ( $s_0 = 0,1$ ) e MMA com variações mais controladas ( $s_0 = 0,9$ ) (*vd.* Eq. 7.53). Apesar do MMA de Svanberg [Svanberg 1987] utilizar por defeito um valor  $s_0 = 0,1$ , verifica-se por vezes que este induz algumas instabilidades. Por um lado, o facto de permitir actualizações mais agressivas das variáveis leva a que a convergência seja muitas vezes mais rápida. É aliás por esta razão que tende a anular mais rapidamente regiões de rigidez reduzida ou flutuante, ao passo que a utilização de  $s_0 = 0,9$  mantém os elementos intermédios patentes no OC. Por outro lado, leva muitas vezes ao aparecimento de ruído em regiões de densidade reduzida, relacionado

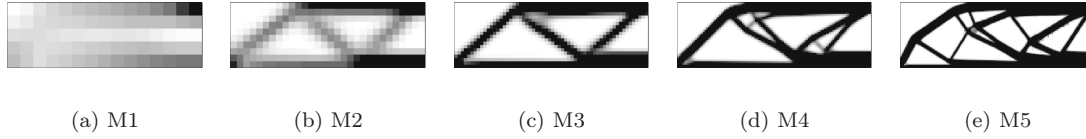


Figura 9.30: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade (F2,  $R = 1,25$ ).

com o comportamento da derivada do SIMP (*vd.* Sec. 5.5), e a ocasionais divergências temporárias ao longo do processo iterativo. Este fenómeno é ilustrado na figura 9.32(a), onde se pode ver a evolução da alteração máxima de densidade para os diferentes métodos. Acrescenta-se aqui uma alternativa também implementada de comportamento misto do MMA. Quando o utilizador define  $s_0 = 0,0$ , o método inicia o processamento com o MMA padrão e aperta a influência de  $s_0$  assim que se detectam instabilidades na sua actuação. Este comportamento é também perceptível na figura 9.32(b), correspondente à evolução da restrição de volume. Chama-se aqui a atenção para o facto da implementação do método MMA utilizada definir as restrições como desigualdades ( $\leq$ ) em vez de igualdades ( $=$ ).

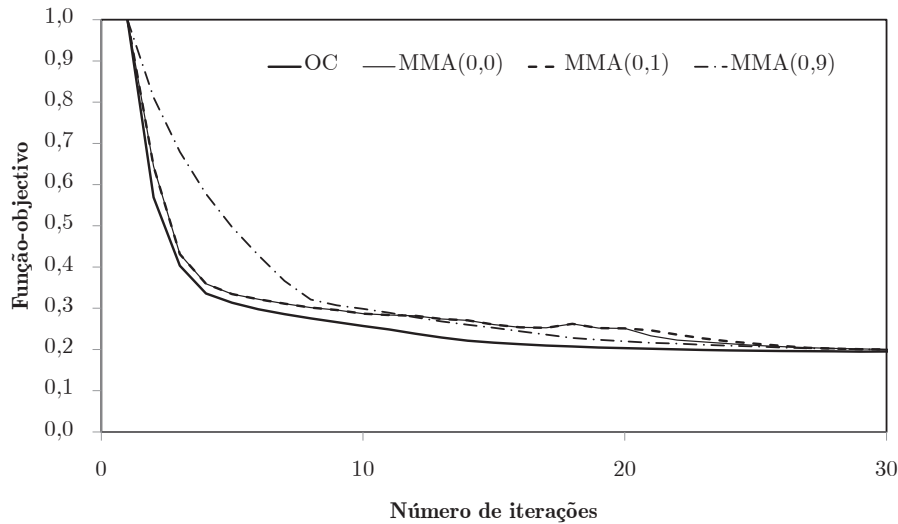
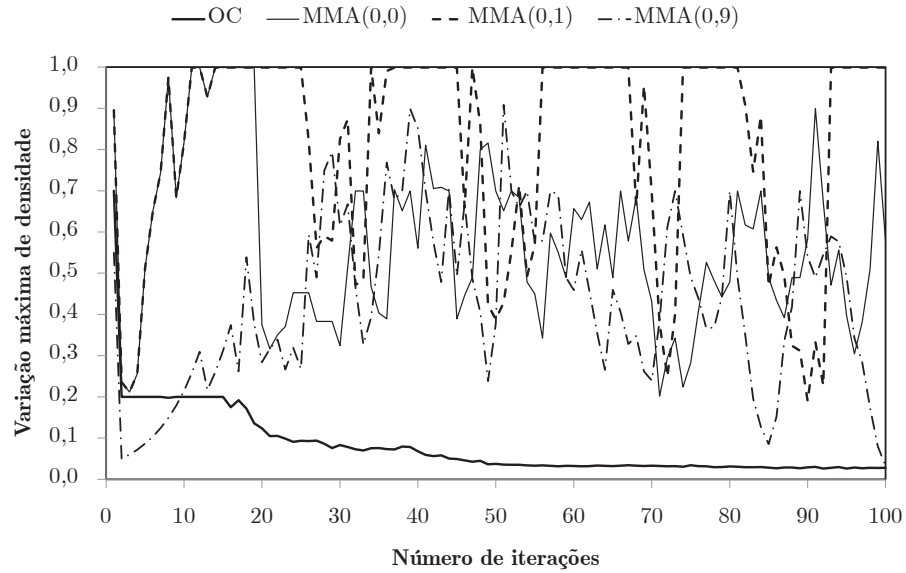
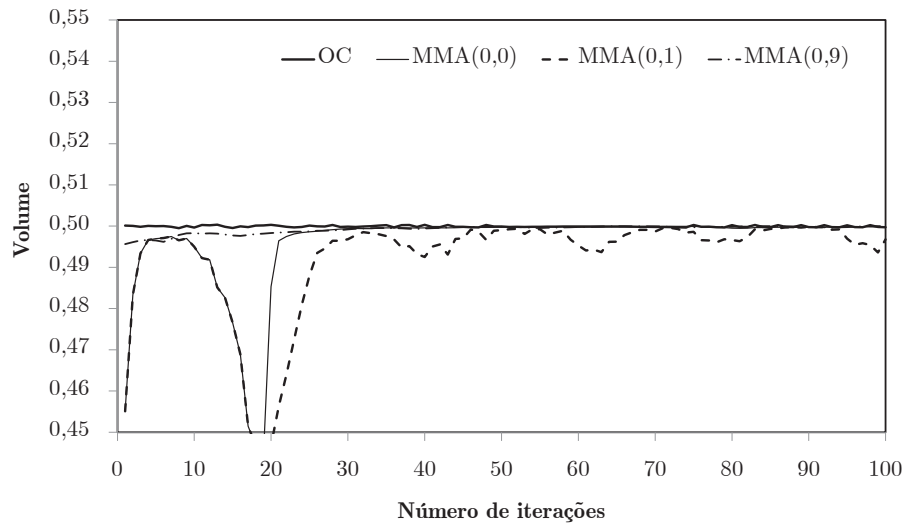


Figura 9.31: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com a discretização M4 e um filtro de sensibilidades F2 ( $\bar{R} = 1,25$ ). Comparação da resolução com os métodos OC e MMA de  $s_0$  variável (0,0),  $s_0 = 0,1$  e  $s_0 = 0,9$ .

Em termos de função-objectivo, as diferenças obtidas com os diferentes métodos para as várias malhas são reduzidas. Esta afirmação é também verdadeira quando se utiliza o CONLIN. Neste trabalho, aproxima-se o CONLIN de duas formas. Por um lado, numa versão de MMA intermédia, fixam-se os limites  $\alpha$  e  $\beta$  nos valores  $\rho_{\min}$  e 1,0, respectivamente. No entanto, continua a permitir-se a mobilidade das asymptotas. Como esperado, o comportamento apresentado neste caso é muito próximo do comportamento do MMA. Como por defeito o MMA usa um  $s_0$  muito relaxado, acaba por conduzir a limites efectivos  $\alpha$  e  $\beta$  não muito diferentes dos fixos. Por sua vez, o CONLIN corresponde a fixar não só os limites móveis do método mas também as próprias asymptotas (*vd.* Sec. 7.4.4), resultando num comportamento distinto. Esta versão do CONLIN apresenta evoluções



(a)



(b)

Figura 9.32: Evolução (a) da variação máxima de densidade e (b) da restrição de volume para um problema de otimização topológica MBB, com a discretização M4 e um filtro de sensibilidades F2 ( $\bar{R}_f = 1,25$ ). Comparação da resolução com os métodos OC, e MMA de  $s_0$  variável (0,0),  $s_0 = 0,1$  e  $s_0 = 0,9$ .

mais estáveis, fruto da distância efectiva entre as assíntotas e os limites das variáveis e converge para soluções com função-objectivo equivalentes aos melhores dos anteriores. As topologias obtidas são apresentadas na figura 9.33.

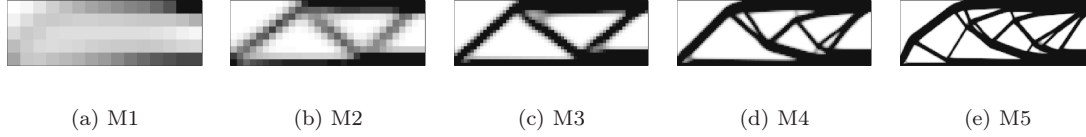


Figura 9.33: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método CONLIN e um filtro de sensibilidade (F2,  $\bar{R}_f = 1,25$ ).

Analisando os exemplos anteriores opta-se pelo MMA de Svanberg, na sua versão original, como o método de optimização para a realização da generalidade dos ensaios que se seguem. Para além de ser fiável e permitir a consideração de restrições adicionais, é menos sensível a pormenores de transição, tendendo a ignorar detalhes topológicos de reduzida espessura. Assim, é possível utilizar os filtros com raios reduzidos. Quando justificado, utilizam-se variações do MMA para estabilizar os problemas em análise. O OC, por sua vez, mostra uma maior dependência de malha e tende a ser mais lento para problemas de grandes dimensões, necessitando tipicamente de mais iterações [Sigmund 2001, Bendsøe e Sigmund 2003]. Além disso, tende a apresentar alguns desequilíbrios em problemas multiobjectivo, mais sensível às normalizações, e resulta em erros numéricos em problemas de termoelasticidade quando as sensibilidades mudam de sinal [Pedersen e Pedersen 2010].

O MMA tende a ser independente do raio escolhido com o filtro F2, obtendo-se as mesmas topologias. No entanto, um raio mais apertado resulta em fronteiras mais limpas, com transições de cinzento mais reduzidas. Isto deve-se ao facto de o filtro F2 contemplar na vizinhança apenas os elementos com conectividade directa, resultando o raio num peso de ponderação das sensibilidades vizinhas. Enquanto o OC se mostra sensível a este peso, o MMA mantém a influência relativa mais ou menos constante, correspondendo a uma baixa sensibilidade a este parâmetro. Neste sentido, utiliza-se ao longo desta secção preferencialmente MMA com este filtro, reduzindo assim a influência do filtro e centrando as análises em cada um dos parâmetros estudados. Note-se, antes de analisar a influência de outros parâmetros, que o programa desenvolvido disponibiliza também outras técnicas de filtragem. Enquanto o filtro de conectividade com uma camada, com o aumento do raio, permite algum controlo de dependência de malha mesmo considerando apenas uma camada de elementos vizinhos, outros filtros mostram-se mais adequados para este efeito. Das diversas técnicas de filtragem implementadas apresentam-se, a título de exemplo, duas estratégias adicionais. Em primeiro lugar, um filtro de conectividades que avalia as camadas de conectividade sequencialmente, dependentes do raio imposto (F3). Note-se que em malhas irregulares este filtro pode alternativamente definir-se o raio relativo consoante a dimensão dos elementos finitos em causa. Nos casos apresentados, com malha regular, o raio efectivo corresponde a valor definido pelo utilizador multiplicado pela distância entre elementos vizinhos. Assim, um raio superior a 2 dá origem a uma fronteira de conectividade com 2 ou mais camadas de elementos. Na figura 9.34 mostram-se exemplos deste filtro F3 com  $\bar{R}_f = 2,5$  e  $\bar{R}_f = 5,0$ . Percebe-se aqui que o aumento do raio tende a gerar soluções cada vez mais independentes do grau de refinamento de malha. Este efeito é ilustrado pelo facto de a malha M5 com raio  $\bar{R}_f = 5,0$  ser essencialmente idêntica à malha M4 com raio  $\bar{R}_f = 2,5$ . Ao mesmo tempo, o aumento do raio acarreta também um aumento de cinzento e a falta de definição para malhas mais grosseiras. A definição deste filtro, no entanto, continua a depender da dimensão dos elementos da malha em utilização. Neste sentido, um filtro com verdadeiro controlo de dependência de malha deve ser absoluto na sua definição. Neste trabalho surgem duas alternativas a este nível. Por um lado, a versão mais simples do filtro

de sensibilidades de Sigmund [Sigmund 2001], onde a vizinhança é definida apenas considerando as distâncias (absolutas) entre elementos (F1). Por outro lado, utiliza-se um filtro de conectividade de raio absoluto (F5). O funcionamento aqui é semelhante ao modo de raio absoluto, sem dependência da dimensão dos elementos, mas considerando a conectividade como necessária. Este raio é, por uma questão de conveniência e opção de implementação, definido não com uma dimensão absoluta mas como percentagem das dimensões globais da estrutura. As topologias resultantes, para uma vizinhança de 10% das dimensões da estrutura, são idênticas para ambos os filtros e apresentadas na figura 9.35. Por um lado, verifica-se que estes filtros dão origem a verdadeira independência de malha. Por outro lado, malhas mais grosseiras podem não ser verdadeiramente filtradas ao tender para vizinhanças que não contenham elementos para além do próprio.

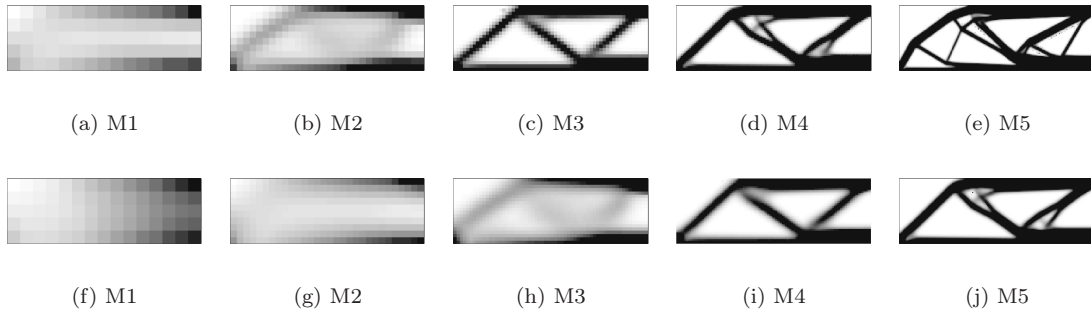


Figura 9.34: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade F3: (a-e)  $\bar{R}_f = 2,5$  e (f-j)  $\bar{R}_f = 5,0$ .

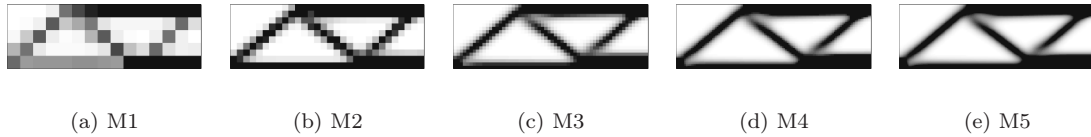


Figura 9.35: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de independência de malha.

Salienta-se o facto de um filtro de independência de malha não garantir necessariamente a solução mais correcta. Este garante apenas alguma simplicidade das soluções impedindo que seja acrescentado detalhe com o refinamento de malha. A solução ideal corresponderia sempre a acrescentar mais furos, aumentando a quantidade de regiões de ligação. Isto corresponde em estado plano de tensão a aproximar das soluções de Michell, *i.e.* de estruturas discretas reticuladas. Este controlo de detalhe pode ser útil em diversos problemas, nomeadamente nas abordagens multi-escala utilizadas neste trabalho. Nestes casos, malhas mais refinadas conduzem a maior detalhe microestrutural, enquanto malhas mais grosseiras reduzem o detalhe. Por um lado, conduzem assim a óptimos de qualidade inferior. Por outro lado, conduzem usualmente a materiais laminados de produção mais fácil.

Retomando a utilização do filtro F2 com  $\bar{R}_f = 1,25$ , por uma questão de uniformização dos estudos a efectuar, apresenta-se ainda como exemplo a sua aplicação como filtro de densidades em vez de sensibilidades. Os resultados são idênticos aos obtidos com o correspondentes filtro de sensibilidades. Este tipo de filtragem pode permitir algum controlo adicional das soluções [Sigmund 2009], nomeadamente ao nível das fronteiras entre fases. Neste trabalho, no entanto, utiliza-se

apenas como elemento de teste pelo facto de tender a deteriorar a periodicidade em problemas com optimização de microestruturas.

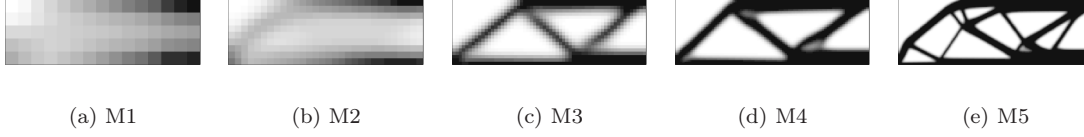


Figura 9.36: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de densidade.

Os filtros utilizados podem ainda ser utilizados com malhas de qualquer elemento finito, visto os procedimentos serem independentes da formulação elementar e serem implementados para funcionar de forma flexível. Mostram-se na figura 9.37 exemplos para malhas de triângulos com diferentes níveis de refinamento, onde os casos 9.37(c) e 9.37(d) são de malhas estruturadas. As topologias obtidas são coerentes com as apresentadas anteriormente.

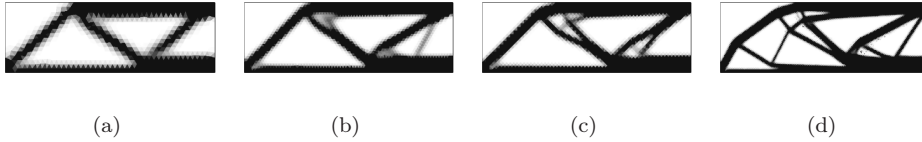


Figura 9.37: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade, utilizando malhas de triângulos.

Uma alternativa de controlo das soluções, nomeadamente em termos de *checkerboards* e nível de detalhe, é o recurso ao controlo de perímetro ou de superfície (*vd.* Sec. 5.4.2). Neste trabalho este é feito com uma restrição adicional, impondo um valor máximo (ou mínimo) de perímetro. Mostra-se na figura 9.38 a influência desta restrição sobre a topologia M4, para  $P \leq 5$ ,  $P \leq 7,5$ ,  $P \leq 10$ ,  $P \leq 15$  e  $P \leq 20$ . Na figura 9.39 mostra-se a evolução das funções-objectivo para estas restrições. Na figura 9.40, por sua vez, ilustra-se a evolução das correspondentes restrições de volume e perímetro, e dos respectivos multiplicadores de Lagrange, para os exemplos de  $P \leq 5$  e  $P \leq 15$ . Verifica-se que a restrição de volume é normalmente respeitada, estando activa e com multiplicadores mais estáveis. As restrições de perímetro, por sua vez, são desrespeitadas numa fase inicial e posteriormente controladas. Isto reflecte-se no comportamento dos multiplicadores de Lagrange, muito mais instáveis e com valores normalmente mais elevados. Para além da maior dificuldade de controlo destas restrições, note-se que a solução inicial utilizada têm uma grande influência neste comportamento. A opção por uma distribuição uniforme de material com densidade equivalente à restrição de volume leva a que esta restrição esteja inicialmente em condições de equilíbrio. Por sua vez, o perímetro inicial (interno) é nulo. Ao deixar que este suba ao encontro do valor da restrição, surge um efeito de inércia numérica que leva o perímetro a ultrapassar a restrição e obriga o método a desestabilizar a evolução do processo para o corrigir. Este problema tende a ser menos crítico para limites de perímetro mais elevados, como se pode observar pelas evoluções mais estáveis das funções-objectivo. Note-se também que, tal como referido para as funções-objectivo, é muito importante a normalização das restrições para um correcto funcionamento do procedimento de optimização utilizado. Neste caso, para a utilização do MMA e procedimentos derivados, utilizam-se tendencialmente restrições do tipo  $g/\bar{g} - 1 \leq 0$ . Este tipo de restrição acarreta alguma dificuldade de controlo. Por um lado, necessita por vezes de algumas avaliações de perímetro inicial para impor um correcto limite. É por esta razão que um limite muito apertado

(vd. Fig. 9.38(a)) mantém muitas vezes regiões de cinzento consideráveis, resultando da dificuldade de transitar dessas regiões de densidade constante (e perímetro reduzido) para zonas definidas. O oposto (vd. Fig. 9.38(d)), por sua vez, pode já trazer alguns padrões *checkerboard*. Por outro lado, a definição de perímetro tende a privilegiar fronteiras orientadas segundo as arestas dos elementos finitos utilizados (tipicamente verticais e horizontais) [Stolpe e Svanberg 2001a]. Chama-se ainda a atenção para o facto de se poder utilizar uma restrição de perímetro mínimo, em detrimento do limite máximo, para tentar induzir soluções mais complexas, com mais elementos estruturais [Coelho *et al.* 2008a]. Este tipo de restrição, no entanto, tende a originar muitos padrões *checkerboard*, caracterizados simultaneamente por aumentos artificiais de rigidez e de perímetro. Esta instabilidade verifica-se tanto neste tipo de problema quanto em problemas de optimização local com periodicidade. Neste último caso, devido às condições de fronteira utilizadas e dentro de limites controlados, esta questão tende a ser menos problemática. Em ambos os casos, a utilização simultânea de filtros de sensibilidade ajuda a controlar estes efeitos sem os anular completamente. Neste trabalho, apesar de implementado, este tipo de restrição não é coerente com a simplicidade de soluções pretendida em materiais compósitos e celulares de engenharia, já que tende a acrescentar detalhe microestrutural.

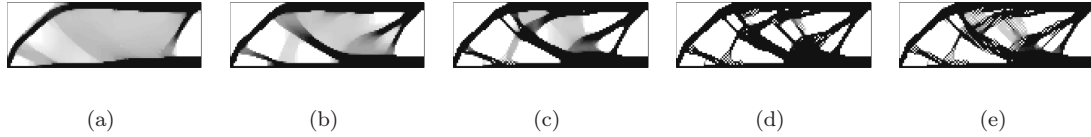
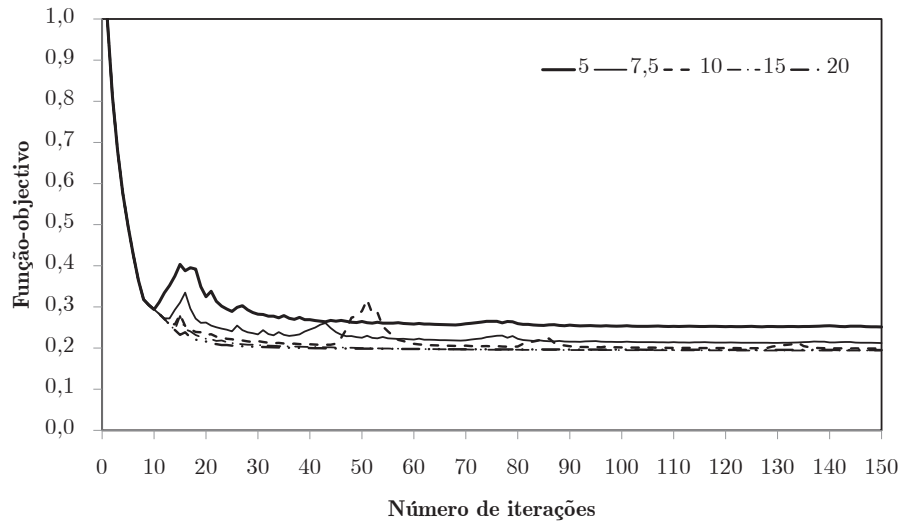
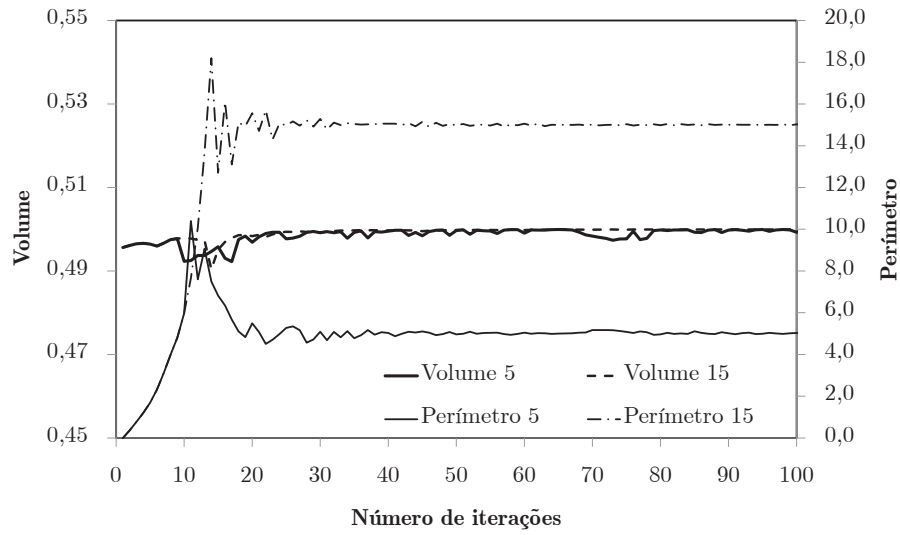


Figura 9.38: Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) utilizando controlo de perímetro: (a)  $P \leq 5$ , (b)  $P \leq 7,5$ , (c)  $P \leq 10$  e (d)  $P \leq 15$ .

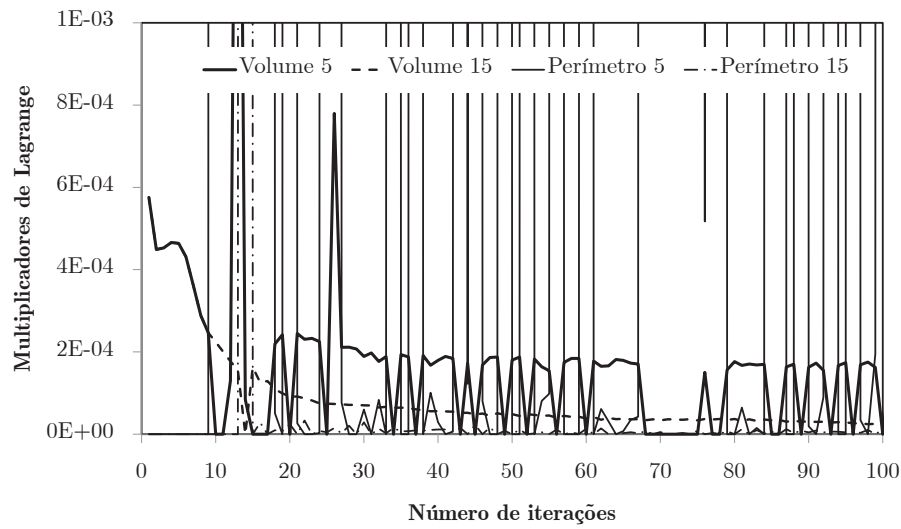


(a)

Figura 9.39: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4 e restrições de perímetro ( $P \leq 5$ ,  $P \leq 7,5$ ,  $P \leq 10$ ,  $P \leq 15$  e  $P \leq 20$ ).



(a)



(b)

Figura 9.40: Evolução (a) das restrições de perímetro e de volume, e (b) dos multiplicadores de Lagrange associados, para um problema de otimização topológica MBB, com discretização M4 e restrições de perímetro ( $P \leq 5$  e  $P \leq 15$ ).



Apesar da eficácia das técnicas ilustradas anteriormente, parte dos problemas de instabilidade numérica advém de questões associadas aos elementos finitos utilizados. Os padrões *checkerboard*, associados comumente ao próprio modelo de interpolação SIMP, é na realidade causado pela tendência de alguns elementos finitos, nomeadamente elementos lineares, gerarem aumentos artificiais de rigidez com estes padrões [Rozvany 2009]. Uma resposta a este nível surge com a utilização de elementos de grau superior. Elementos quadráticos, por exemplo, tendem a reduzir de forma considerável estes problemas. Isto pode ver-se na figura 9.41, onde se mostram resultados dos problemas apresentados utilizando elementos quadriláteros quadráticos de 9 nós, sem qualquer tipo de controlo de instabilidade. As topologias obtidas com elementos serendipíticos de 8 nós são omitidas por serem praticamente coincidentes. A minimização mostra-se eficiente, com comportamento da função-objectivo comparável aos resultados anteriores. A grande limitação desta abordagem, para além da evidente dependência de malha (limitável com métodos de continuação), é o custo computacional. O aumento do tempo de processamento é aproximadamente proporcional ao aumento do número de graus de liberdade, apesar de, para o mesmo número de nós, as resoluções dos problemas demorarem mais tempo para Q8 e ainda mais para Q9. No entanto, o grande problema é o facto de a topologia ser regida pelo número de elementos. Na figura 9.42 mostra-se que os problemas são muito mais onerosos do que os problemas resolvidos com um número equivalente de elementos de 4 nós.

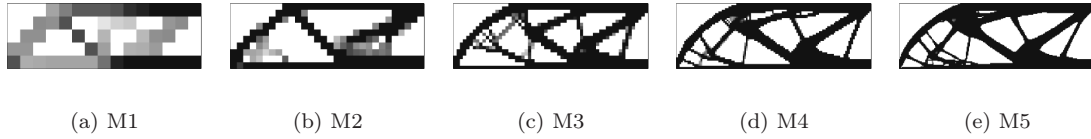


Figura 9.41: Topologias obtidas na resolução do problema MBB utilizando elementos quadriláteros quadráticos.

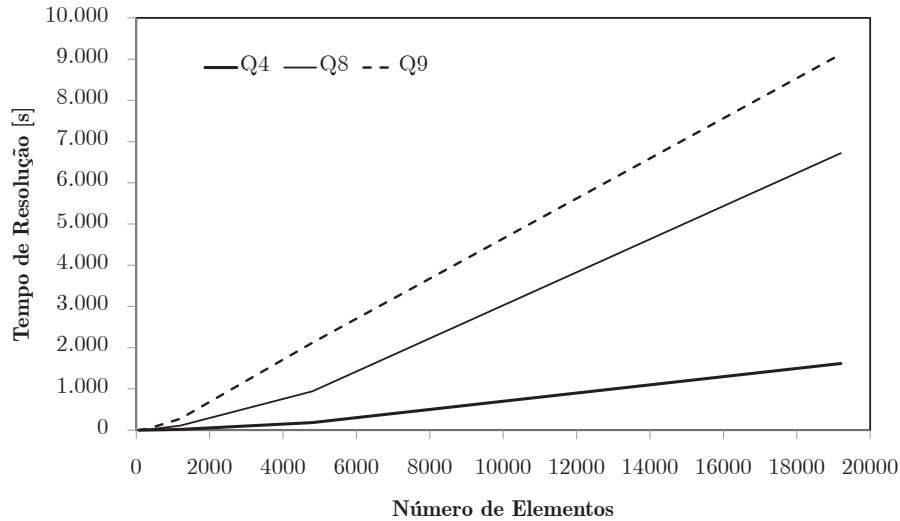


Figura 9.42: Comparação dos tempos de execução, em função do número de elementos finitos dos problemas, entre elementos lineares de 4 nós e quadráticos de 8 e 9 nós.

É necessário destacar alguns parâmetros adicionais. Um dos principais é a penalidade utilizada

no SIMP. Por um lado, a utilização de penalidades baixas tende a manter densidades intermédias que se podem considerar uma aproximação ao detalhe da solução ideal. Por outro lado, a perturbação induzida pela penalização reduz estas regiões, tornando as soluções aproximadamente discretas e gerando fases distintas correspondentes a estruturas definidas. Na figura 9.43 mostra-se, utilizando o filtro F2 com raio 1,25, resultados da optimização do problema M4 com  $p = 1$ ,  $p = 2$ ,  $p = 3$  e  $p = 4$ . Note-se que ao longo deste trabalho usa-se normalmente  $p = 3$  [Bendsøe e Sigmund 2003], exceptuando em problemas locais, que serão abordados em secções posteriores. Verifica-se para  $p = 2$  que a penalidade não é suficiente para penalizar alguns elementos estruturais finos e com densidades intermédias, correspondendo a uma solução com uma distribuição mais gradual de elementos estruturais. Com  $p = 4$  já se nota um processo inverso, onde a penalização tende a definir alguns detalhes antes que as densidades intermédias os levem a desaparecer. A este efeito está também associada uma tendência de gerar-se fronteiras mais definidas com penalizações mais elevadas.



Figura 9.43: Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) utilizando as penalidades (a)  $p = 1$ , (b)  $p = 2$ , (c)  $p = 3$  e (d)  $p = 4$ .

Outro efeito da penalização é a variação da função objectivo (*vd.* Fig. 9.44). As curvas normalizadas aqui apresentadas dependem do valor inicial da função-objectivo. Para a mesma solução inicial, de  $\rho = f_v$  em todos os elementos, a avaliação inicial da função-objectivo aumenta para o dobro com cada subida de um valor na penalização. Isto deve-se ao facto de tornar a solução inicial, de densidade constante, duas vezes mais flexível. Por sua vez, os valores finais absolutos das funções-objectivo apresentam diferenças relativas de 15%, 5% e 0,5% com cada aumento de penalidade. Estes correspondem a valores que aumentam com a subida da penalidade, seguindo a mesma tendência dos deslocamentos máximos, o mais imediato reflexo da rigidez efectiva da estrutura. Relacionando a minimização da energia de deformação com o aumento da rigidez de uma estrutura real a única curva que, na realidade, traduz de forma correcta a evolução de rigidez da estrutura é a referente a  $p = 1$ . Enquanto que para  $p = 1$  a estrutura inicial se relaciona com a rigidez do material de base por  $K f_v$ , para qualquer um dos outros casos a rigidez efectiva da estrutura inicial é  $K f_v^p$ . Assim, para penalidades superiores à unidade, a estrutura inicial é muito mais flexível do que a relação com a restrição de volume deixa antever. Este comportamento reflecte-se também na relação entre fases da solução. O “vazio” para  $p = 1$  é  $10^9$  vezes mais rígido que o correspondente em  $p = 4$ . Esta é uma das razões pelas quais as soluções com penalidades superiores são gradualmente menos rígidas. A outra é o facto de a solução com  $p = 1$  corresponder mais naturalmente ao nível de detalhe que se esperaria da real solução óptima, sem limitações de resolução associadas à malha. Isto tem ainda impacto no condicionamento dos sistemas de equações e sua resolução. Além disso, penalidades maiores tendem a tornar o comportamento do método de optimização menos estável em regiões de densidade próxima de zero, devido ao comportamento da derivada do SIMP. Este aspecto é particularmente sensível com a existência de filtros, levando à ocorrência de flutuações e, especialmente com filtros mais abertos, à formação de ilhas isoladas de material supérfluo [Bendsøe e Sigmund 2003]. A suavização do problema por acção do filtro dá por vezes demasiado peso a elementos de densidade baixa, resultando em sensibilidades pontualmente elevadas e ao aparecimento de material.

Algumas das questões referidas, nomeadamente em termos de propriedades efectivas do vazio, são também válidas no que diz respeito à densidade mínima  $\rho_{\min}$ . Utiliza-se usualmente  $\rho_{\min} =$

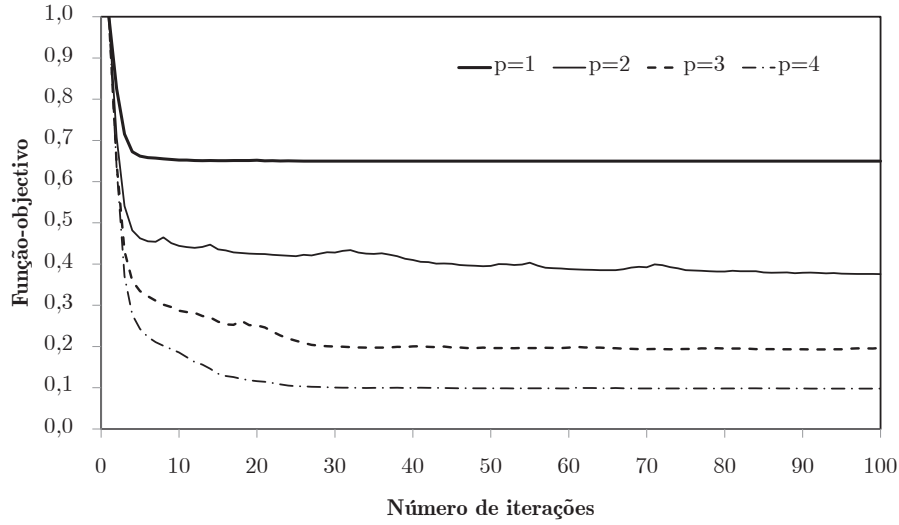


Figura 9.44: Evolução da função-objectivo obtida na resolução do problema MBB (M4), utilizando as penalidades  $p = 1$ ,  $p = 2$ ,  $p = 3$  e  $p = 4$ .

0,001, mas a manipulação deste valor de densidade mínima pode influenciar os resultados obtidos e o comportamento dos algoritmos de resolução do sistema de equações. Opta-se por omitir as curvas da evolução de funções-objectivo e topologias obtidas, sendo próximas das apresentadas anteriormente, mas constata-se, por um lado, que  $\rho_{\min} = 0,1$  é em muitos casos suficiente para obter topologias correctas. Verifica-se, no entanto, que  $\rho_{\min} = 0,01$  dá maiores garantias a este nível. A utilização de valores mais altos de  $\rho_{\min}$  conduz, da mesma forma que penalidades mais baixas, a problemas mais bem condicionados e menores tempos de resolução dos sistemas de equações. Atente-se, no entanto, a que a influência conjunta de ambos pode ser contraproducente, sendo necessário estudar correctamente o seu efeito antes de tentar estabilizar os sistemas relaxando os dois em simultâneo. Note-se ainda que o relaxamento do valor de densidade mínima tende a diminuir instabilidades associadas às sensibilidades em regiões de densidades próximas de 0, críticos especialmente com MMA e filtros. Adicionalmente, ao calcular o volume efectivo como  $\sum(\rho_e v_e)$ , a relação entre os volumes das diferentes fases na topologia final tem sempre um erro associado relativamente à fracção volúmica imposta. Este erro é tanto maior quanto mais  $\rho_{\min} \neq 0$  e é ilustrado na figura 9.45 considerando diferentes fracções volúmicas impostas. Sendo  $f_v$  a fracção volúmica de material de densidade  $\rho = 1$  numa distribuição de duas fases e a fracção volúmica imposta é na realidade  $\bar{f}_v = f_v \times 1 + (1 - f_v) \times \rho_{\min}$ , o resultado é uma fracção volúmica inferior à pretendida.

Para além da consideração de materiais compósitos e diferentes relações entre fases constituintes, também as questões de condicionamento podem ser melhoradas recorrendo a modelos de SIMP modificado. Esta afirmação tem particular relevo em problemas malcondicionados como os micro-estruturais aqui abordados. Neste trabalho utiliza-se preferencialmente o modelo da equação 5.16, controlado essencialmente pelo parâmetro  $d_m$ . Com este, é possível limitar as diferenças de magnitude dos coeficientes das matrizes de rigidez de diferentes elementos, por um lado, e estudar o comportamento de diferentes combinações de propriedades entre fases. Adicionalmente, permite a utilização de  $\rho_{\min}$  mais baixos (no limite  $\rho_{\min} = 0$ ) e penalidades mais elevadas sem reflexo directo no condicionamento dos sistemas de equações. Note-se que, para  $p = 3$ , com  $d_m = 0,001$  se tem a mesma relação de magnitudes entre coeficientes da matriz de rigidez relativos a fases rígida e flexível que com  $\rho_{\min} = 0,1$  e  $d_m = 0$ . Mantendo os valores padrões utilizados ao longo desta secção ( $\rho_{\min} = 0,001$  e  $p = 3$ ), mostra-se na figura 9.46 a influência deste parâmetro nas topologias obti-

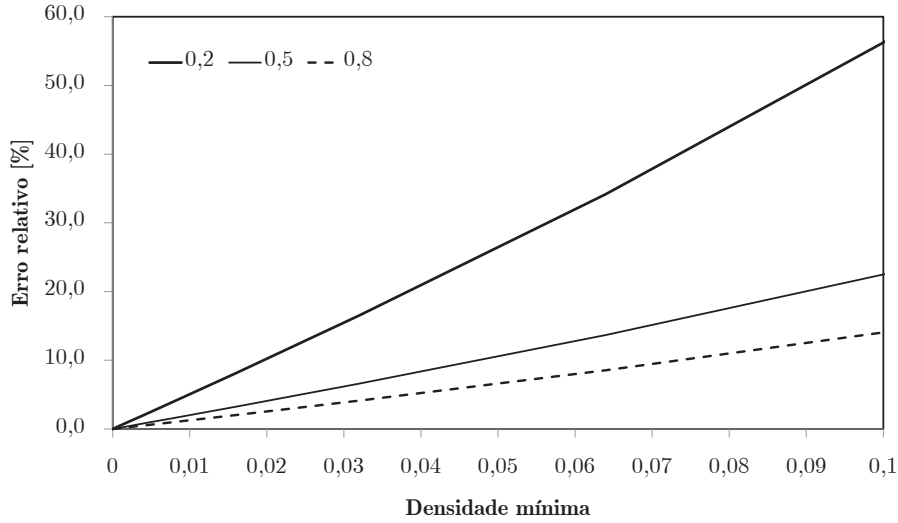


Figura 9.45: Erro relativo associado   frac  o vol mica efectiva das fases obtidas em optimiza  o topol gica em fun  o da varia  o da densidade m nima,  $\rho_{\min}$ , para frac  es vol micas impostas de  $f_v = 0,2$ ,  $f_v = 0,5$  e  $f_v = 0,8$ .

das. As solu   es aproximam-se das do SIMP geral com  $d_m \leq 0,001$ . Valores mais elevados de  $d_m$  correspondem j  a fases flex veis cuja rigidez   demasiado elevada para ser comparativamente desprez vel face   fase r gida, traduzindo diferentes topologias  ptimas, correspondentes, neste caso, a combina   es de constituintes como, por exemplo, de materiais comp sitos. Verifica-se ainda que a utiliza   o de valores  $d_m$  pouco reduzidos tendem a gerar mais “ru do” em zonas de densidade nula,   semelhan a do referido anteriormente para a utiliza   o de MMA com filtros de raio mais elevado. Tal como nesse caso, apertar os limites de actualiza   o das vari veis reduz este fen meno, potenciado pela aproxima   o das propriedades efectivas das diferentes fases em conjugac   o com a derivada do SIMP em zonas de densidade baixa.



Figura 9.46: Topologias obtidas na resolu   o do problema MBB (M4) utilizando (a)  $d_m = 0,1$ , (b)  $d_m = 0,01$ , (c)  $d_m = 0,001$  e (d)  $d_m = 0,0001$ .

Nesta aprecia   o geral de modos de funcionamento e par metros de optimiza   o, um tipo de abordagem que   amplamente utilizada na implementa   o em an lise diz respeito aos m todos de continua   o (*continuation methods*). Estes constituem uma forma de tentar controlar algumas das limita    es num ricas enunciadas anteriormente. Por um lado, podem aumentar a estabilidade de um algoritmo, como j  referido para o caso do par metro  $s_0$  do MMA. Por outro lado, podem permitir o refinamento das solu    es com menos tend ncia para convergir para  ptimos locais. Salientam-se duas aplica    es, ao n vel do factor de penalidade do SIMP e do raio em t cnicas de filtragem. Em termos de penalidade, inicia-se a resolu   o do problema de optimiza   o com  $p = 1$  e depois vai-se aumentando o valor ao longo do processo iterativo. Esta actualiza   o

pode ser progressiva ou, como apresentado nas funções-objectivo ilustradas na figura 9.47, entre valores inteiros. As actualizações são feitas de acordo com intervalos definidos pelo utilizador ou, caso o processo estabilize antes, quando dados parâmetros de convergência são respeitados. As curvas apresentadas correspondem à resolução do problema M4 utilizando um método OC, MMA padrão e o MMA com  $s_0 = 0,9$ . As topologias intermédias apresentadas correspondem ao OC, representativas de soluções com diferenças apenas ligeiras entre a aplicação dos diferentes métodos. Estas diferenças centram-se essencialmente na influência dos dois elementos mais finos, que na solução apresentada oscilam em torno de cinzentos e nos MMA rapidamente desaparecem. No caso do OC, estes elementos estruturais estabilizam em densidades intermédias com  $p = 3$  e depois passam a oscilar em torno dessas com  $p = 4$ , com pouca alteração até ao final. Aliás, na generalidade das aplicações a transição de  $p = 3$  para  $p = 4$  mostra-se sempre a mais regular, traduzindo-se normalmente por uma definição adicional das fronteiras, diminuindo as densidades de transição. Chama-se ainda a atenção para as diferenças entre as topologias das iterações 50 e 52, com uma muito rápida influência do aumento de penalidade na redução de cinzentos e definição de elementos estruturais de densidade  $\rho = 1$ . Verifica-se que as diferenças entre valores absolutos das funções-objectivo, referidas anteriormente durante a análise da influência da penalidade, dão origem ao tipo de curva apresentado. A redução de rigidez efectiva das regiões de densidade intermédia com o aumento da penalidade dá origem às falhas de continuidade nas funções-objectivo, aumentando os seus valores. No caso do MMA, devido à actualização mais agressiva de densidades, estes pontos são por vezes acompanhados de alguma instabilidade, levando a atrasos na convergência. Converge-se, no entanto, para soluções muito aproximadas.

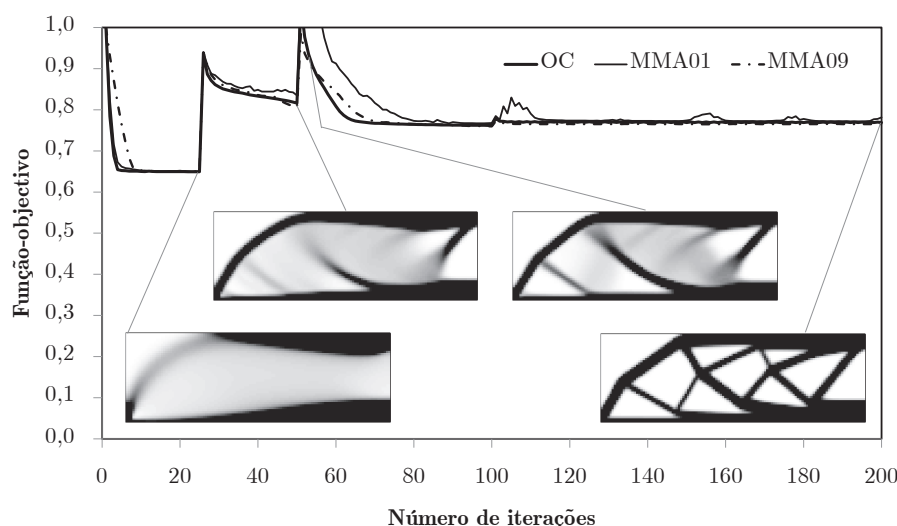


Figura 9.47: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, resolvido com um método de continuação actuando sobre a penalidade do SIMP ( $p = 1, \dots, 4$ ).

Se nos exemplos anteriores surgem algumas diferenças entre métodos de optimização, ainda que reduzidas, a aplicação de métodos de continuação ao nível de filtros de sensibilidade tende a conduzir o processo iterativo para soluções virtualmente idênticas. Apresentam-se na figura 9.48 as funções-objectivo correspondentes à utilização dos mesmos métodos de optimização. Neste caso, utilizou-se um filtro de conectividade de múltiplas camadas de elementos (F3), iniciando o processo com um raio  $\bar{R}_f = 10$ , gradualmente dividido por 2 até  $\bar{R}_f = 1,25$ . As topologias apresentadas correspondem ao MMA com  $s_0 = 0,9$ , por serem as que apresentam maior detalhe. Verifica-se, no entanto, que as diferenças entre os diferentes métodos são neste caso perfeitamente insignificantes.

Na realidade, todos convergiram para topologias próximas das apresentadas com o MMA no início desta secção. Este método, utilizando parâmetros padrão, é mais agressivo e tende a ser mais instável.

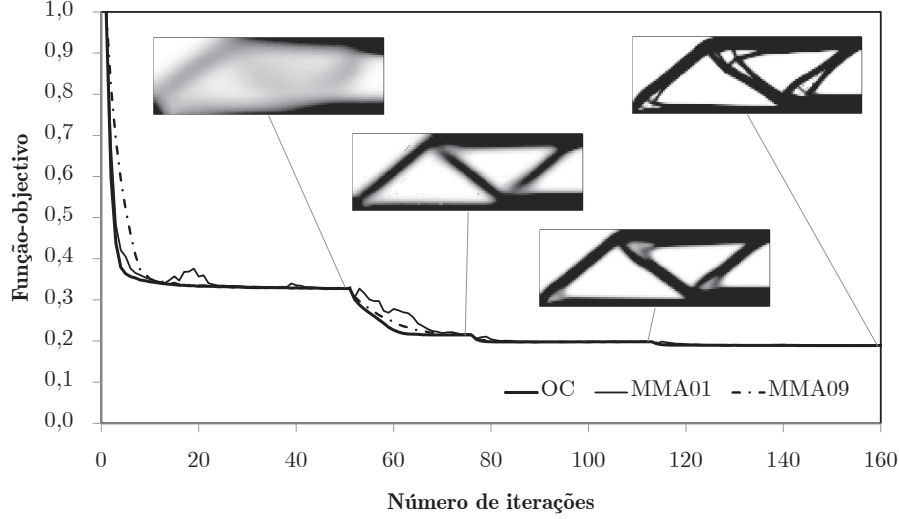


Figura 9.48: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, resolvido com um método de continuação actuando sobre o raio de um filtro de sensibilidades.

Mostra-se ainda a utilização de elementos passivos, neste caso com a imposição de uma fronteira de  $\rho = 1$ . Na figura 9.49 mostram-se as soluções para cada um dos diferentes níveis de refinamento. Na figura 9.50, por sua vez, mostra-se a influência da restrição de volume, no caso da malha M4. As topologias apresentadas correspondem a fracções volúmicas de material de  $f_v = \{0,2; 0,4; 0,6; 0,8\}$ . No caso  $f_v = 0,2$ , verifica-se que as limitações impostas pela utilização de um domínio discretizado com uma resolução gráfica específica impede a convergência para o mesmo tipo de configuração topológica. Verifica-se que o comportamento dos métodos de optimização topológica depende acen-tuadamente do refinamento de malha utilizado. À medida que a restrição de volume aponta para fracções mais reduzidas, é necessário um número cada vez maior de elementos (*ground elements*) para caracterizar a solução. Se a malha não tiver resolução suficiente, torna-se impossível reproduzir o nível de detalhe necessário para a correcta transmissão de carga, reduzindo a sua eficiência. No limite, para fracções muito baixas, pode deixar de ser sequer possível gerar uma estrutura conexa e a função-objectivo aumenta, teoricamente, para infinito [Rozvany 2009].

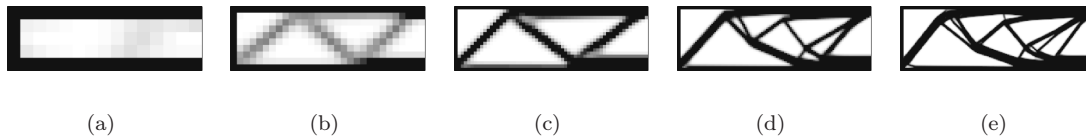


Figura 9.49: Topologias obtidas na resolução do problema MBB utilizando elementos passivos ( $\rho = 1$ ).

Em termos de função-objectivo, por sua vez, ilustra-se na figura 9.51 a evolução do processo iterativo. À semelhança do que foi referido em casos anteriores, a utilização de valores normalizados



Figura 9.50: Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) com restrição de volume (a)  $f_v = 0,2$ , (b)  $f_v = 0,4$ , (c)  $f_v = 0,6$  e (d)  $f_v = 0,8$ .

dá neste caso informações contraditórias. Verifica-se que a redução relativa da função-objectivo, muito superior para as fracções volúmicas mais baixas, está novamente relacionada com a solução inicial. Assim, a rigidez efectiva a estrutura inicial não corresponde à fracção volúmica imposta ( $f_v$ ) mas sim a  $(f_v)^P$ .

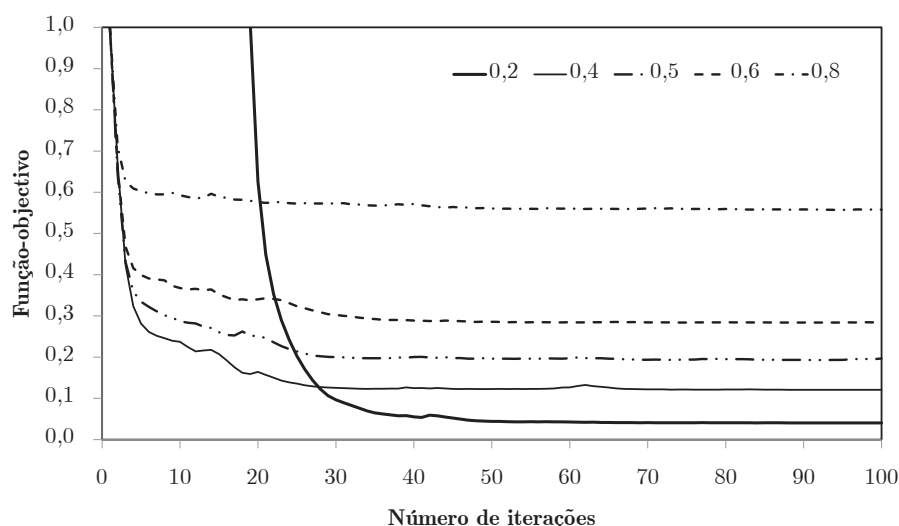


Figura 9.51: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, para diferentes fracções volúmicas de material.

A resolução do mesmo problema com prescrição de deslocamentos em vez de carregamentos traz algumas pequenas *nuances*. Neste caso, o problema passa a ser de maximização da energia de deformação, pela maximização da rigidez. Contudo, as sensibilidades continuam a ser idênticas e toda a implementação mantém-se inalterada. Como os processos de optimização utilizados se baseiam em gradientes e não nos valores da função-objectivo, o processo efectivo de optimização continua a ser o mesmo, mas com um reflexo diferente sobre a evolução do objectivo. Mantendo-se o campo de deslocamentos praticamente inalterado, o aumento de rigidez da estrutura resultante de uma distribuição de sensibilidades essencialmente idêntica leva a um aumento da energia de deformação. Resolvendo novamente o mesmo problema, verifica-se que são obtidas exactamente as mesmas topologias (*vd.* Fig. 9.30). A evolução das funções-objectivo é a apresentada na figura 9.52(a), observando-se um aumento gradual da energia de deformação, reflexo do aumento da rigidez. Na figura 9.52(b) apresentam-se as curva inversas. Constata-se que estas são idênticas às apresentadas anteriormente para o problema de imposição de carregamentos e reforça-se a conclusão de que resulta na mesma topologia e no objectivo equivalente. Esta abordagem tem, no entanto, algumas implicações. Os sistemas de equações tornam-se mais sensíveis a tolerâncias



mais reduzidas. As deformadas em regiões de rigidez reduzida tendem a flutuar devido à diferença acentuada de coeficientes da matriz de rigidez por causa da utilização de penalidades na prescrição de deslocamentos. Este efeito é ilustrado na figura 9.53, correspondente às iterações 8, 19 e 34 do problema anterior. Este fenómeno, no entanto, é mais notório nas iterações iniciais e só tem reflexos efectivos nos resultados da optimização para tolerâncias mais relaxadas. Note-se que implicações maiores podem surgir em problemas de optimização multiobjectivo. Neste caso é necessário algum cuidado suplementar na ponderação de objectivos, já que podem seguir tendências diferentes do esperado. Mais uma vez, o controlo é feito pelas sensibilidades, pelo que tende a conduzir aos mesmos resultados. No entanto, a análise da evolução do problema e dos valores efectivos das funções-objectivo pode ser prejudicada.

### 9.3.1.2 Abordagem Aproximada

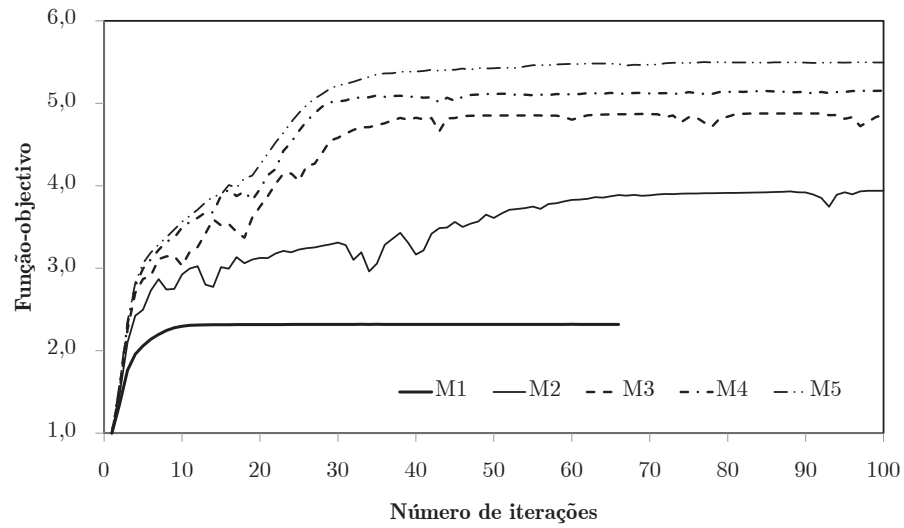
Designa-se aqui por abordagem aproximada a resolução dos problemas descritos anteriormente considerando soluções aproximadas para os campos de deslocamentos. Neste caso, pretende-se avaliar a relação de custo e benefício entre a elevada qualidade das soluções obtidas na parte usualmente mais onerosa da resolução de um problema de optimização topológica, o sistema de equilíbrio, e o seu custo computacional [Amir *et al.* 2009, Amir e Sigmund 2010]. O aspecto dominante nestes casos é a precisão do cálculo de sensibilidades para uma dada aproximação do campo de deslocamentos e a influência da falta de exactidão das sensibilidades no processo global de optimização. Neste caso, utilizou-se uma abordagem de paragem prematura do método do gradiente conjugado com preconditionamento (PCG) [Amir *et al.* 2010].

Os problemas apresentados até aqui foram resolvidos com um método de gradiente conjugado com preconditionamento de sobre-relaxação sucessiva simétrica (SSOR), utilizando uma tolerância de controlo de convergência de  $t = 10^{-6}$ . No entanto, verifica-se que os métodos de optimização topológica implementados se mantêm muito estáveis até tolerâncias bastante mais relaxadas na resolução do sistema de equilíbrio. A título de exemplo, mostram-se na figura 9.54 as topologias obtidas para tolerâncias de  $t = 10^{-1}$  e  $t = 10^{-2}$ , caso M4. Nestes casos, os erros ao nível do campo de deslocamentos são já assinaláveis, mas, ao conduzirem a campos que, em termos formais, se mantêm coerentes, as topologias obtidas são ainda aceitáveis. Mesmo com tolerâncias baixas as topologias são aproximadas em grande medida por causa das diferenças de magnitude da rigidez, levando a que os erros se concentrem nas regiões de densidade baixa e a representação da estrutura óptima seja aproximada. Verifica-se, aliás, que, para este problema, uma tolerância de  $t = 10^{-2}$  é ainda aceitável, apesar de mostrar já alguns desequilíbrios. Até  $t = 10^{-2}$  percebem-se pequenas irregularidades, mas a topologia ainda é a mesma, assim como o valor da função-objectivo com diferenças inferiores a 0,3%. No caso de  $t = 10^{-1}$ , verificam-se já sinais de perda evidente de eficiência. Estas questões se tornam mais críticas com malhas mais refinadas.

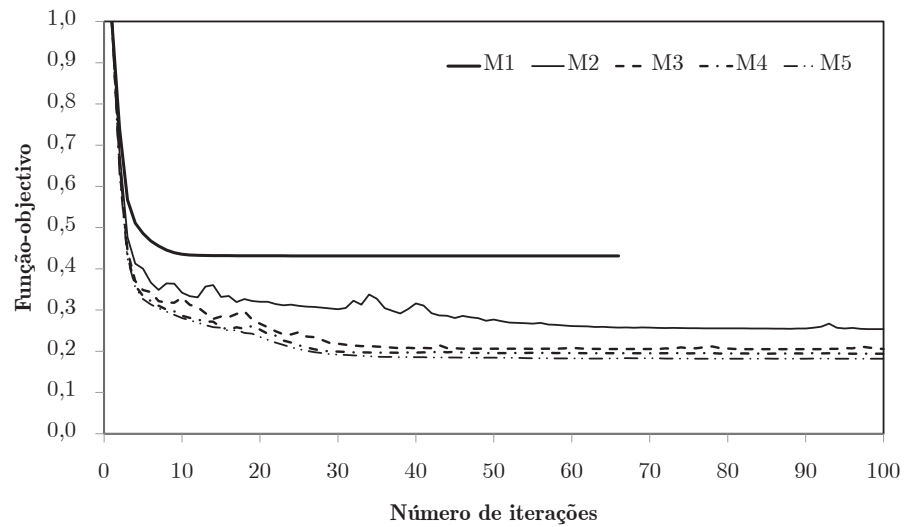
Na figura 9.55 mostra-se as implicações práticas da utilização de tolerâncias mais relaxadas no tempo de resolução do problema M4. Mostra-se ainda a influência de outros parâmetros abordados anteriormente. Por um lado, verifica-se que parâmetros como  $d_m$ ,  $p$  ou  $\rho_{\min}$  têm real impacto nos tempos de processamento. Estas diferenças surgem acima de tudo pela influência no condicionamento do sistema de equações. No caso da tolerância do método do gradiente conjugado, a influência é evidente nos tempos de resolução. Isto é verdadeiro quer se use ou não um preconditionador, já que o sistema de equações inicial é o mesmo. No entanto, para além dos evidentes benefícios da utilização de preconditionamento em termos de velocidade de convergência, em problemas onde o condicionamento do sistema seja crítico um método sem preconditionamento pode nem sequer convergir para tolerâncias mais apertadas. Esta questão é particularmente perceptível ao comparar o comportamento de diferentes iterações, nomeadamente a primeira iteração com uma distribuição homogénea de material e excelente condicionamento, e iterações com diferenças acentuadas de densidades com penalizações elevadas.

Em termos gerais, para tolerâncias menos apertadas, apesar da aproximação mais grosseira em termos de deslocamentos, o cálculo de sensibilidades é consistente, sendo estas precisas face à aproximação que é calculada. No entanto, o comportamento deste tipo de aproximação tende





(a)



(b)

Figura 9.52: Evolução da função-objetivo para um problema de otimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resultante da prescrição de deslocamentos: (a) curvas obtidas e (b) curvas inversas.

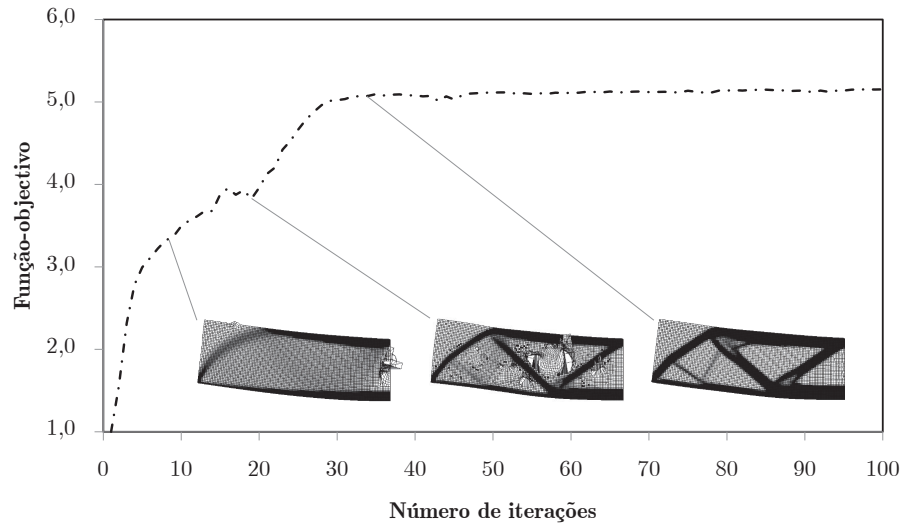


Figura 9.53: Ilustração de desequilíbrios em zonas de densidade reduzida num problema de otimização topológica MBB, com discretização M4, resultante da prescrição de deslocamentos.

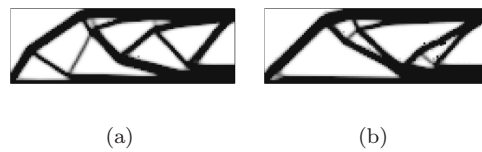


Figura 9.54: Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) com tolerâncias de resolução de (a)  $t = 10^{-1}$  e (b)  $t = 10^{-2}$ .

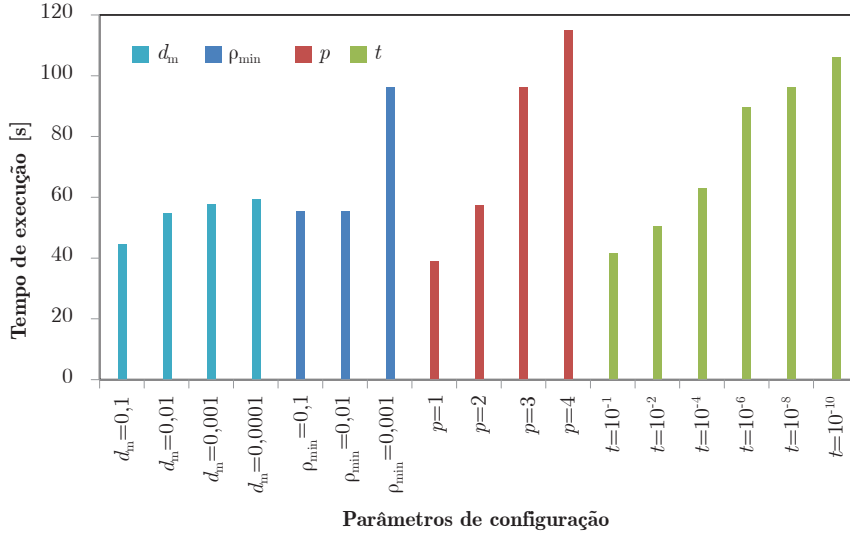


Figura 9.55: Comparação de tempos de resolução de um problema de optimização topológica (M4) em função da variação dos parâmetros  $d_m$ , densidade mínima, penalidade do SIMP e tolerância da resolução de sistema de equações.

a variar com o problema, já que o CG não se comporta da mesma forma com todos os tipos de solicitação.

### 9.3.2 Termoelasticidade

A optimização topológica de problemas de termoelasticidade acarreta algumas complexidades associadas ao facto de as solicitações serem dependentes das variáveis de projecto. Para analisar o seu comportamento recorre-se a um problema comum na bibliografia [Rodrigues e Fernandes 1995, Li *et al.* 1999, Xia e Wang 2008, Gao e Zhang 2010, Pedersen e Pedersen 2010], ilustrado na figura 9.56. A restrição de volume utilizada é  $f_v \leq 0,5$ .

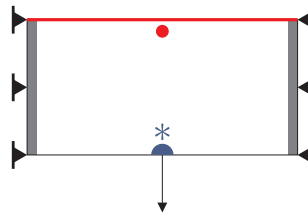


Figura 9.56: Ilustração das condições de fronteira de um problema de termoelasticidade linear (\* – fonte fria, • – fonte quente).

É necessário referir que o problema apresentado tem algumas variantes. Parte das referências consultadas usam regiões de domínio com densidade prescrita ( $\rho = 1$ ), representada na figura a cinzento. Apresentam-se aqui as duas hipóteses. Além disso, o problema definido na bibliografia impõe uma variação de temperatura,  $\Delta T$ , constante em toda a estrutura. O estudo que se segue é efectuado desta forma, mas refere-se posteriormente a influência de um campo de temperaturas variável, alternativamente resolvido com a imposição de temperaturas ou fluxos de calor na fonte quente, de acordo com o representado na figura 9.56. A malha estruturada de elementos finitos

quadriláteros lineares é constituída por  $80 \times 40$  elementos [Li *et al.* 1999]. Na figuras 9.57 e 9.58 apresentam-se as topologias obtidas com e sem regiões de densidade prescrita, respectivamente. As variações de temperatura impostas enquadram-se no intervalo  $-1 \text{ K} \leq \Delta T \leq 1 \text{ K}$ . Refira-se que, para além das instabilidades inerentes a este tipo de problema, a convergência muito lenta [Bruyneel e Duysinx 2004] levou a que o número de iterações necessário para atingir estas soluções tenha sido em diversos casos da ordem de várias centenas. Verifica-se, no entanto, que os problemas resolvidos com elementos passivos tendem a convergir mais rapidamente. Analisando as referências, são utilizadas em alguns casos aproximações adicionais para tentar equilibrar o problema, seja considerando o coeficiente de expansibilidade térmica constante [Xia e Wang 2008] ou penalidades diferentes para componentes mecânica e termomecânica [Gao e Zhang 2010]. Neste último caso, ao separar a penalização de densidades do SIMP nas componentes mecânica e termomecânica, controla-se separadamente o comportamento de cada um dos problemas. A penalidade mais alta no problema mecânico leva a que este problema seja dominante em termos da agressividade de contabilização das sensibilidades, conseguindo-se uma penalização efectiva das densidades intermédias e desenhos mais definidos. Quando se aumenta a penalidade do problema termomecânico, aumenta-se o impacto das oscilações associadas às componentes termoelásticas, tornando a convergência mais delicada. Este tipo de fenómeno é observado nos resultados apresentados. Em termos gerais, sem separação de penalização, no entanto, a utilização de penalidades mais elevadas tende a melhorar ligeiramente a convergência. Na formulação apresentada, esta acaba por ser uma luta inglória. Ao privilegiar a redução de deslocamentos, a melhor forma de minimizar os efeitos termoelásticos é fazer desaparecer o material. É por esta razão que alguns problemas resultam em volumes efectivos menores do que a fracção volumica imposta (note-se que a implementação de MMA utilizada usa restrições do tipo  $\leq$ ). Os problemas de convergência e estabilidade estão perfeitamente documentados no trabalho de Bruyneel e Duysinx [Bruyneel e Duysinx 2004], estando intimamente ligados com a falta de monotonia dos problemas e o comportamento dos métodos de optimização utilizados nesse tipo de problema. Verifica-se que os métodos utilizados não são adequados à resolução deste tipo de problema [Bruyneel e Duysinx 2004]. Note-se ainda que o OC implementado não permite sequer a sua resolução, já que os critérios utilizados e a definição de multiplicadores de Lagrange não são adequados a sensibilidades positivas [Pedersen e Pedersen 2010].

Para o problema com regiões de densidade prescrita, a evolução das funções-objectivo resultantes apresenta-se na figura 9.59. Pode daqui depreender-se que os problemas são tão mais estáveis quanto mais reduzida for a variação de temperatura. O comportamento apresentado pode ser analisado com base nas curvas das figuras 9.60, onde se mostra a evolução das sensibilidades e dos carregamentos térmicos, respectivamente, nos nós centrais superior (1296) e inferior (2124) da estrutura. Estas curvas, como exemplo ilustrativo, correspondem a  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  e  $\Delta T = 1 \text{ K}$ . Para  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  a sensibilidade no ponto de aplicação de carregamento mecânico é sempre negativa, reflexo do facto de este ser dominante. Este é um dos critérios de estabilidade da resolução deste tipo de problema com os métodos aqui utilizados. As instabilidades surgem com a oscilação de sinal das sensibilidades, quebrando a monotonia dos problemas de optimização aqui abordados. Refira-se que o carregamento mecânico aqui imposto é  $F = 1 \times 10^5 \text{ N}$ . No entanto, este carregamento é aplicado num ponto isolado enquanto que os carregamentos térmicos surgem distribuídos por toda a estrutura, somando-se na sua influência nas sensibilidades. Este efeito é perfeitamente representado no ponto superior, onde as sensibilidades oscilam de forma evidente. Isto deve-se ao facto de o problema termomecânico se sobrepor aqui ao mecânico. No entanto, anula-se a existência de material e estabiliza-se o processo, limitando a dilatação e concentrando material onde é necessária rigidez para responder ao carregamento mecânico. Esta estabilização é notória no que diz respeito a carregamentos de origem térmica. A rápida convergência local de material no ponto de aplicação do carregamento mecânico torna o carregamento térmico correspondente constante. É neste caso estável porque o carregamento térmico é inferior ao carregamento mecânico. Já com  $\Delta T = 1 \text{ K}$ , o processo comporta-se de forma diferente. O problema termomecânico sobrepõe-se ao mecânico e as oscilações são evidentes mesmo para o ponto de aplicação do carregamento mecânico. Neste caso, o

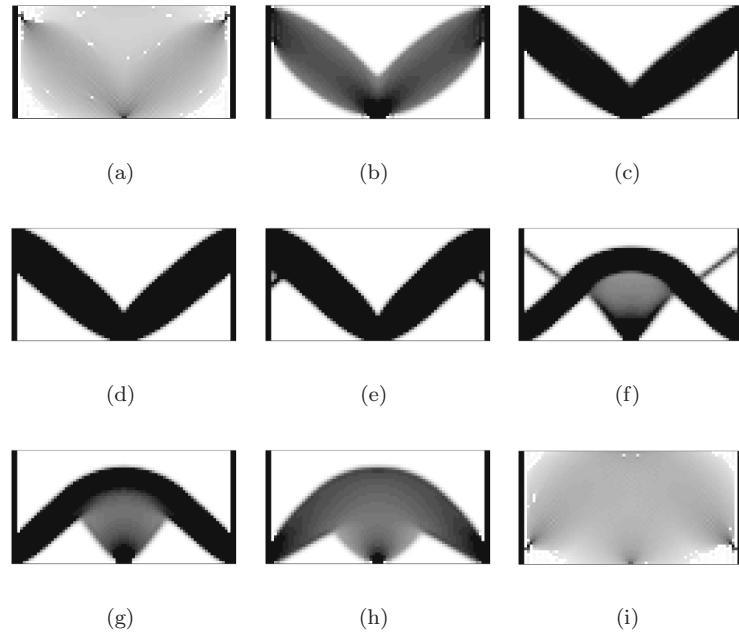


Figura 9.57: Topologias obtidas na resolução de um problema geral de termoelasticidade com elementos passivos: (a)  $\Delta T = -1$  K, (b)  $\Delta T = -0,1$  K, (c)  $\Delta T = -0,05$  K, (d)  $\Delta T = -0,025$  K, (e)  $\Delta T = 0$  K, (f)  $\Delta T = 0,025$  K, (g)  $\Delta T = 0,05$  K, (h)  $\Delta T = 0,1$  K e (i)  $\Delta T = 1$  K.

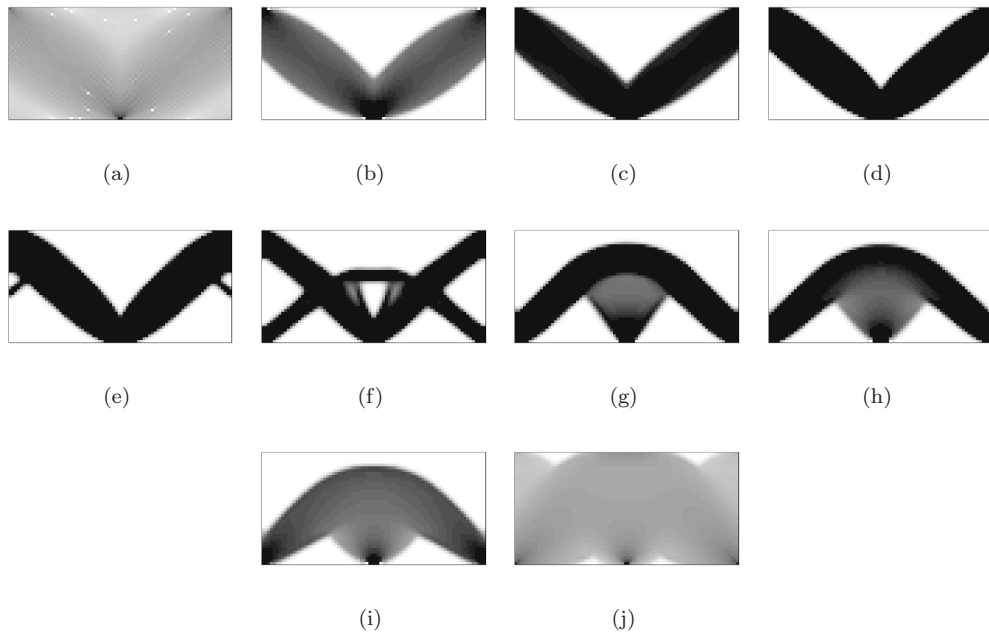


Figura 9.58: Topologias obtidas na resolução de um problema geral de termoelasticidade: (a)  $\Delta T = -1$  K, (b)  $\Delta T = -0,1$  K, (c)  $\Delta T = -0,05$  K, (d)  $\Delta T = -0,025$  K, (e)  $\Delta T = 0$  K, (f)  $\Delta T = 0,025$  K, (g)  $\Delta T = 0,05$  K, (h)  $\Delta T = 0,1$  K e (i)  $\Delta T = 1$  K.

facto de as dilatações tenderem a sobrepor-se à deformação mecânica origina uma clara quebra de monotonia do problema, patente nas oscilações de sinal das sensibilidades e no facto de o problema estabilizar numa solução (divergente) de densidades intermédias que mantêm os deslocamentos artificialmente equilibrados entre rigidez necessária para equilibrar o carregamento mecânico e a ausência de material necessária para reduzir dilatação. Isto pode ser analisado na representação da figura 9.61, relativa às energias envolvidas. Verifica-se que ao retirar a parcela de energia relativa à componente de dilatação, patente na lei de Duhamel-Neumann (*vd.* Eq. 4.14), o equilíbrio entre a área respeitante à componente estritamente mecânica e a área complementar restante, ditada pela componente de expansão térmica, determina a estabilidade do problema. Este permite atingir soluções válidas quando a área correspondente à parte mecânica é superior e se mantém a monotonia do problema. Caso contrário, observa-se que ao minimizar o trabalho das forças externas (*compliance*), pode ser vantajoso reduzir o volume efectivo de material na estrutura. Por esta razão, torna-se ambígua a escolha deste tipo de objectivo em problemas de termoelasticidade [Pedersen e Pedersen 2010]. Isto deve-se ao facto de minimizar o trabalho das forças externas ser equivalente a minimizar a função energia de deformação elástica, já que a componente de energia de deformação termoelástica faz parte do trabalho das forças externas. Assim, o problema comporta-se como um problema de minimização de deslocamentos, independentemente da sua origem.

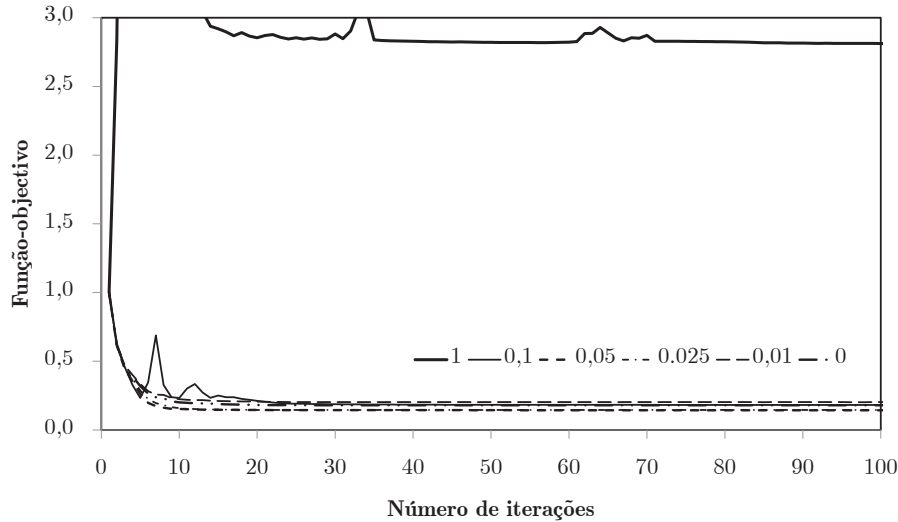
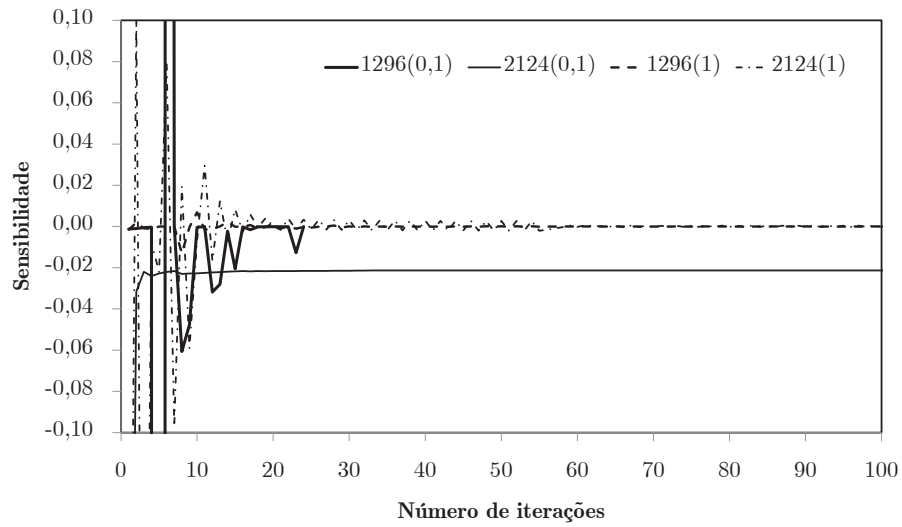


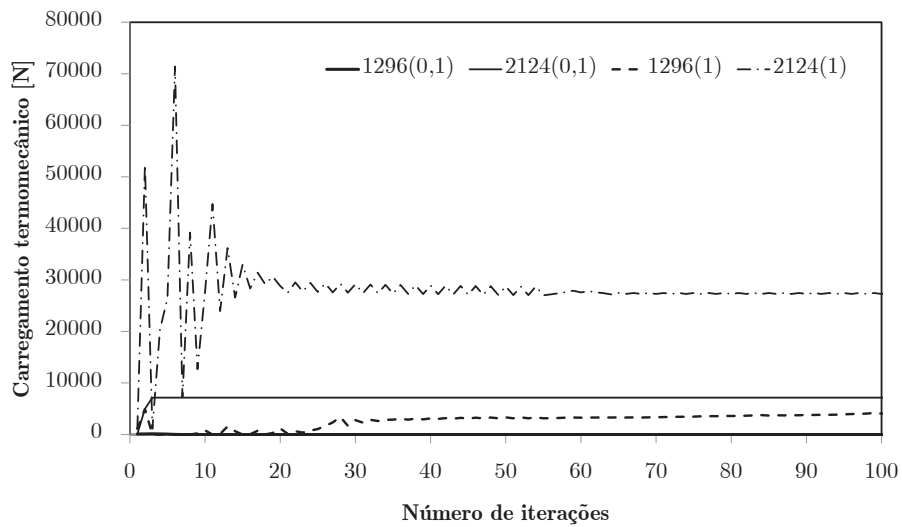
Figura 9.59: Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica em termoelasticidade, com diferentes valores de temperatura prescrita constante.

A resolução do problema apresentado com um problema térmico de temperaturas variáveis, por sua vez, conduz a resultados como os apresentados na figura 9.62. Mostra-se na figura 9.62(a) a topologia resultante da utilização de fluxos superficiais de calor na fonte quente ( $\bar{q} = 40 \text{ Wm}^{-2}$ ). Alternativamente, a utilização de temperaturas prescritas na fonte quente conduzem às topologias apresentadas na figura 9.62(b) para  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  e na figura 9.62(c) para  $\Delta T = 1,0 \text{ K}$ .

O facto de as condições de fronteira de prescrição de temperaturas resultarem num gradiente térmico com uma redução gradual de variações de temperatura e consequentemente de dilatações leva a que as soluções sejam topologicamente mais definidas do que nos casos anteriores. Em contrapartida, o problema torna-se completamente divergente para a prescrição de fluxos superficiais de calor. Observa-se que a resolução deste tipo de problema com fluxos de calor tende a divergir, mesmo para valores reduzidos. As instabilidades surgem porque a existência de fluxos de dada intensidade correspondem a um fluxo de energia predefinido. Quando não existe material com densidade suficiente para conduzir calor em condições normais, os gradientes térmicos necessários



(a)



(b)

Figura 9.60: Evolução de um problema de otimização topológica em termoelasticidade, com temperatura prescrita constante de  $\Delta T = 0,1$  K e  $\Delta T = 1,0$  K: (a) evolução de sensibilidades locais e (b) evolução do carregamento termomecânico resultantes, para os elementos 1296 e 2124.

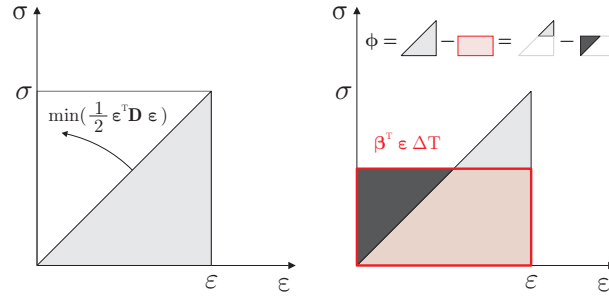


Figura 9.61: Representação esquemática das parcelas mecânica e termomecânica da função densidade de energia de deformação.

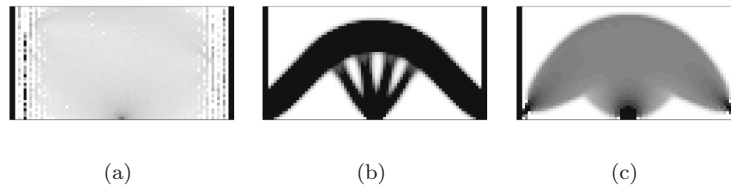


Figura 9.62: Topologias obtidas na resolução de um problema geral de termoelasticidade com temperaturas variáveis, utilizando uma fonte quente de (a) fluxo de calor superficial  $\bar{q} = 40 \text{ Wm}^{-2}$ , e de temperatura imposta (b)  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  e (c)  $\Delta T = 1,0 \text{ K}$ .

para corresponder aos fluxos impostos tornam-se cada vez maiores. Com este aumento, aumenta também a dilatação associada e é novamente reduzida a densidade. Este torna-se um ciclo de instabilidades, levando à divergência do problema. Estes aspectos são ilustrados nas figuras 9.63, com representação da evolução das funções-objectivo, e 9.64, com sensibilidades e carregamentos termomecânicos. Note-se que o problema com fluxos de calor diverge de forma praticamente instantânea, passando a oscilar de forma acentuada até ao fim do processo.

À semelhança dos estudos anteriores, retoma-se, a título de exemplo, o problema MBB. Neste caso, considera-se juntamente com o problema mecânico original a existência de campos de variação de temperatura constantes de  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  e  $\Delta T = 1 \text{ K}$ . Estes resultam nas topologias, obtidas para a malha M4, apresentadas na figura 9.65. O comportamento observado é coerente com a análise efectuada anteriormente.

### 9.3.3 Cálculo Multiobjectivo

Na abordagem geral do comportamento do programa mainFRAN em problemas macroestruturais de optimização topológica, resta abordar o cálculo multiobjectivo. Este divide-se nesta secção em duas partes, uma referente a multiobjectivos mecânicos, isto é, problemas com carregamentos múltiplos, e ponderação de objectivos mecânicos e térmicos. Apesar do código permitir a utilização de termoelasticidade como modo suplementar de carregamento múltiplo ou como problema incluído em cálculo multiobjectivo, opta-se aqui por recorrer a problemas exclusivamente mecânicos e/ou térmicos.

Começando pela consideração de problemas multicarregamento, acrescentam-se ao problema original MBB dois modos de carga suplementares, de acordo com o ilustrado na figura 9.66. Este problema é em primeiro lugar resolvido considerando os dois primeiros carregamentos, com uma ponderação do segundo carregamento de  $w_2 = \{0; 0,2; 0,5; 0,8; 1\}$ . As topologias obtidas, conside-



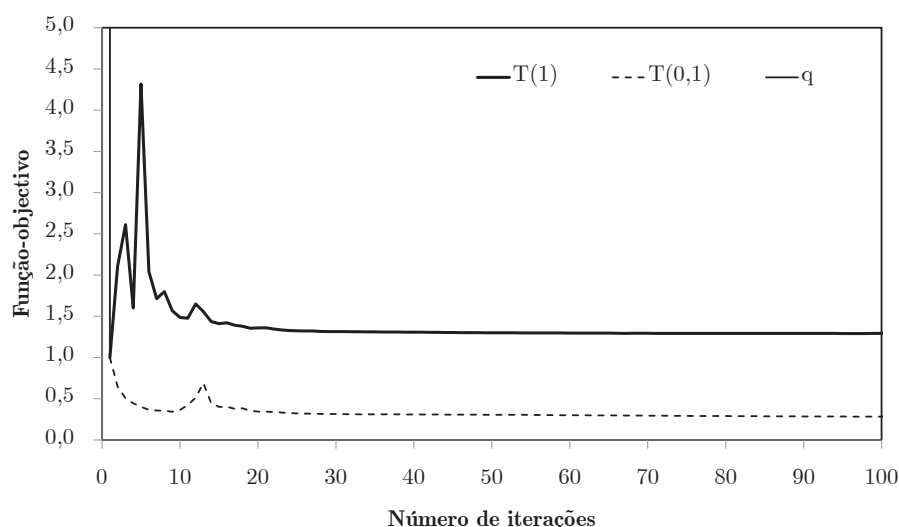


Figura 9.63: Evolução de funções-objectivo obtidas na resolução de um problema de optimização topológica em termoelasticidade com imposição de um campo de temperaturas variável recorrendo a uma fonte quente com prescrição de temperaturas ou de fluxos superficiais de calor.

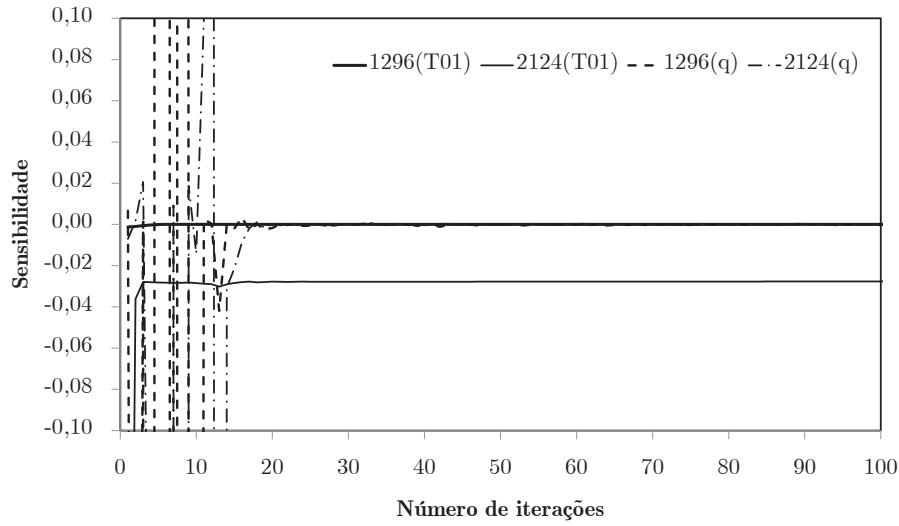
rando aqui o problema resolvido com a discretização M4, são apresentadas na figura 9.67.

Nas figuras 9.68(a) e (b) mostram-se as topologias resultantes da optimização isolada do terceiro modo de carregamento e e da ponderação equitativa dos três modos de carga apresentados, respectivamente. Os deslocamentos associados a cada um dos problemas de carregamento são representados na figura 9.69, considerando a topologia que melhor equilibra os três. As funções-objectivo correspondentes à resolução de cada um dos problemas isoladamente, assim como do problema multicarregamento considerando os três em simultâneo, são ilustradas na figura 9.70. A evolução dos objectivos associados aos dois primeiros carregamentos é muito semelhante, já que a natureza dos problemas é idêntica. No caso do terceiro carregamento, observa-se uma convergência bastante mais rápida do objectivo a minimizar, assim como da configuração topológica geral. Este é, aliás, um dos casos onde se verifica a afirmação anterior da própria resolução do sistema de equações e do algoritmo do gradiente conjugado ter comportamentos diferentes consoante o problema. Isto deve-se ao facto de se tratar de um problema de tracção, que neste caso tende a ser de resolução mais simples que os problemas de flexão.

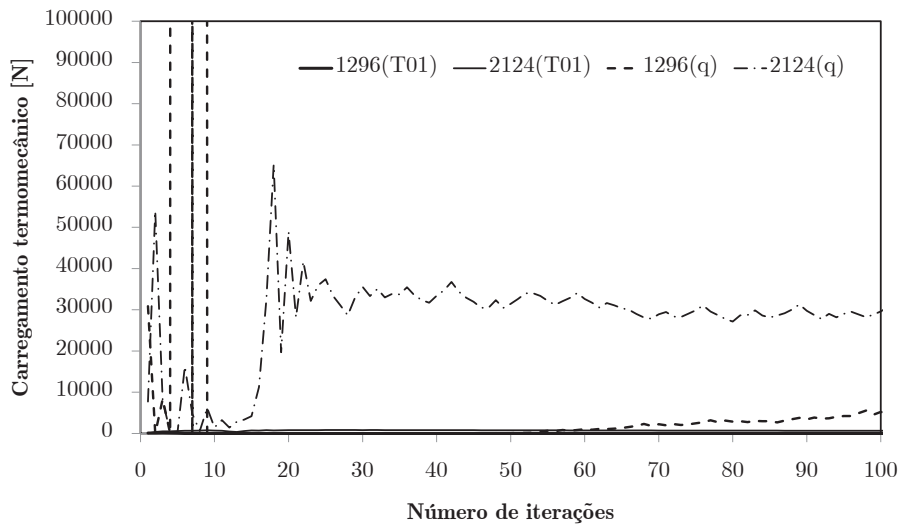
Chama-se ainda a atenção para as diferenças notórias entre um problema multicarregamento e a simples soma de carregamentos, cujas topologias são apresentadas na figura 9.71. Nestes casos, em vez de estruturas que equilibrem a resposta a diferentes solicitações são obtidas estruturas que respondem a uma solicitação única correspondente à aplicação simultânea de diferentes cargas.

Quanto à resolução de problemas multiobjectivo, resolve-se aqui um problema semelhante ao apresentado por de Kruijf *et al.* [de Kruijf *et al.* 2007]. Ilustra-se este problema na figura 9.72, onde são apresentadas as condições de fronteira do problema mecânico e a fonte fria do problema térmico. A fonte quente é distribuída em toda a geometria, recorrendo a fluxos superficiais de calor por condução. Utiliza-se na resolução deste problema uma malha de  $80 \times 80$  elementos finitos quadriláteros lineares. A restrição de volume corresponde a  $f_v = 0,4$ .

As topologias obtidas são apresentadas na figura 9.73, para pesos de ponderação do problema térmico de  $w_t = \{0; 0,1; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 0,9; 1\}$ . Verifica-se que as soluções obtidas são idênticas às da bibliografia [de Kruijf *et al.* 2007]. A utilização do método MMA com controlo progressivo do parâmetro  $s_0$ , graças à sua estabilidade adicional, leva a que estas se apresentem geralmente mais simétricas que as apresentadas na bibliografia. As funções-objectivo (normalizadas) para estes casos



(a)



(b)

Figura 9.64: Evolução de um problema de otimização topológica em termoelasticidade com imposição de um campo de temperaturas variável recorrendo a uma fonte quente com prescrição de temperaturas ou de fluxos superficiais de calor: (a) sensibilidades locais e (b) carregamentos de origem térmica, para os elementos 1296 e 2124.

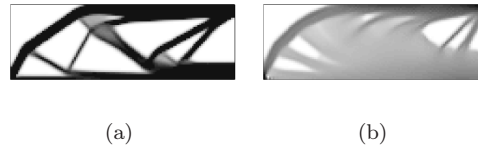


Figura 9.65: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com termoelasticidade, aplicando um campo de temperaturas constante de (a)  $\Delta T = 0,1$  K e (b)  $\Delta T = 1$  K.

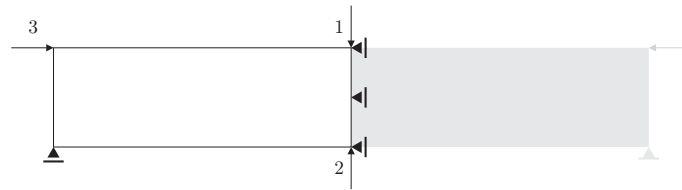


Figura 9.66: Ilustração de carregamentos alternativos para a resolução de um problema de otimização topológica.

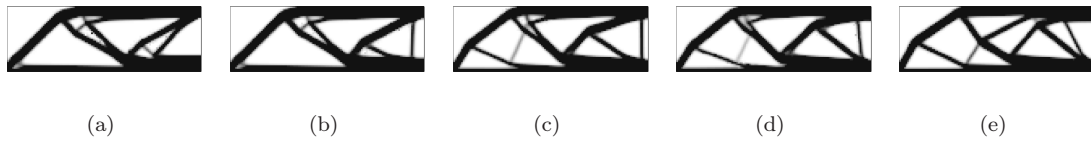


Figura 9.67: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com dois carregamentos múltiplos: (a)  $w_2 = 0$ , (b)  $w_2 = 0,2$ , (c)  $w_2 = 0,5$ , (d)  $w_2 = 0,8$  e (e)  $w_2 = 1$ .



Figura 9.68: Topologias obtidas na resolução do problema MBB com três carregamentos múltiplos: (a)  $w_3 = 1$  e (b)  $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ .

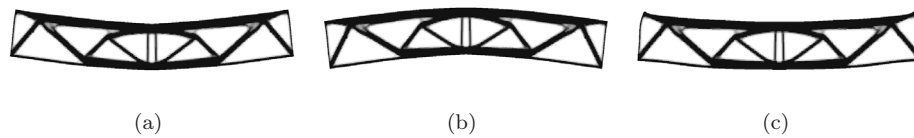


Figura 9.69: Deformadas correspondentes aos três modos de carga do problema MBB multicarregamento, para a topologia obtida na resolução do problema MBB com três carregamentos múltiplos,  $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ , segundo os carregamentos (a) 1, (b) 2 e (c) 3.

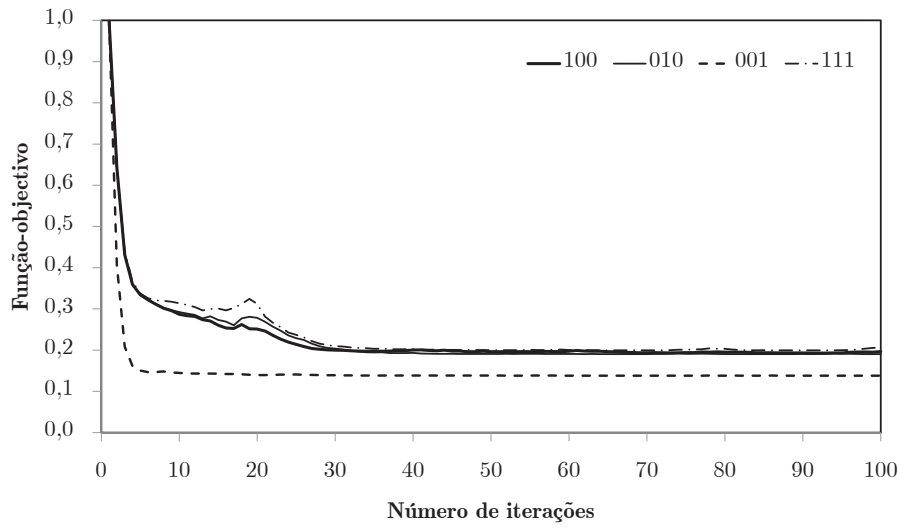


Figura 9.70: Evolução das funções-objetivo na resolução de problemas de otimização topológica de carregamentos múltiplos ( $\mathbf{w} = \{1, 0, 0\}$ ,  $\mathbf{w} = \{0, 1, 0\}$ ,  $\mathbf{w} = \{0, 0, 1\}$  e  $\mathbf{w} = \{1, 1, 1\}$ ).



Figura 9.71: Topologias correspondentes à soma de carregamentos (a) 1 e 2, e (b) 1, 2 e 3.

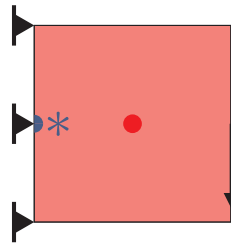


Figura 9.72: Representação esquemática de um problema multiobjetivo (\* – fonte fria, • – fonte quente) [de Kruijff *et al.* 2007].

são apresentadas na figura 9.74(a), mostrando-se os valores obtidos para os objectivos mecânico, térmico e global. A relação entre objectivos e a forma como estes evoluem em sentidos inversos é ilustrada também na figura 9.74(b), onde se mostra uma curva de Pareto. Note-se que os óptimos de cada objectivo correspondem a pontos de utopia, dificilmente conciliáveis com o outro objectivo em análise. Na realidade, estes são muitas vezes incompatíveis, levando a que um peso elevado dado a um dos objectivos invalide uma solução viável do outro. Isto é particularmente notório ao constatar que cada um dos objectivos normalizados tende para valores piores que a solução inicial quando o outro objectivo é privilegiado. É comum este problema agudizar-se quando existe uma diferença pronunciada entre propriedades em regiões de densidades-limite, levando muitas vezes à incapacidade de resolver os sistemas de equações. Por esta razão, os exemplos aqui apresentados utilizam  $d_m = 0,001$  para garantir a estabilidade das soluções limite. É também por esta razão que valores das funções-objectivo nos extremos de ponderação nula não se tornam demasiado elevados. A influência das soluções em cada objectivo alternativo pode ainda ser ilustrada com recurso à figura 9.75. Mostram-se os campos de deslocamento e temperatura para as soluções óptimas de  $w_t = 0,1$  e  $w_t = 0,9$ . Verifica-se que ao valorizar o objectivo mecânico se reduzem os deslocamentos, mas tornam-se necessários gradientes térmicos muito superiores para garantir o fluxo de energia necessário ao escoamento imposto. O inverso é igualmente verdadeiro.

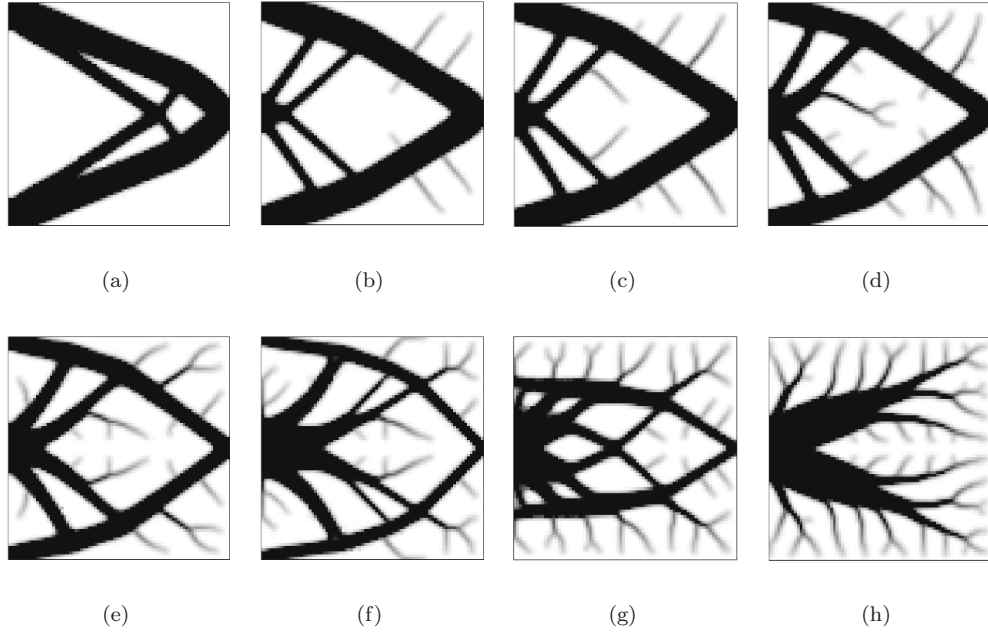
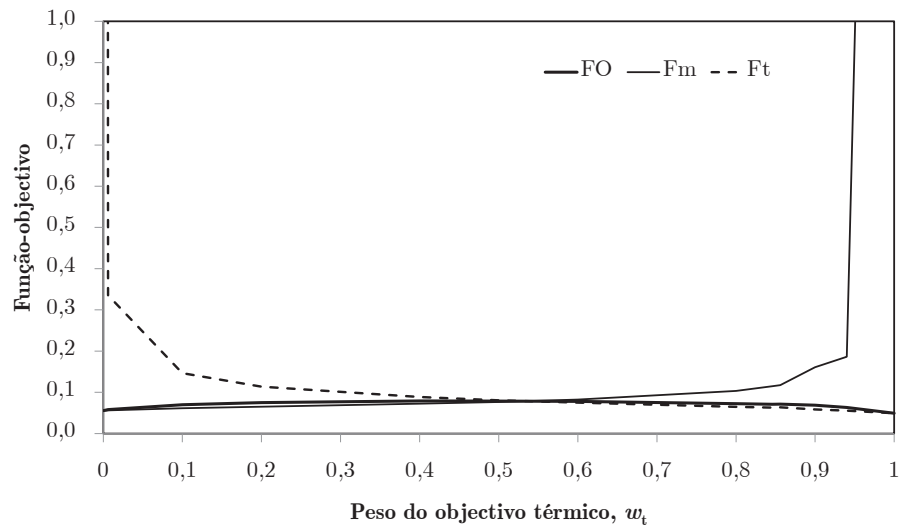
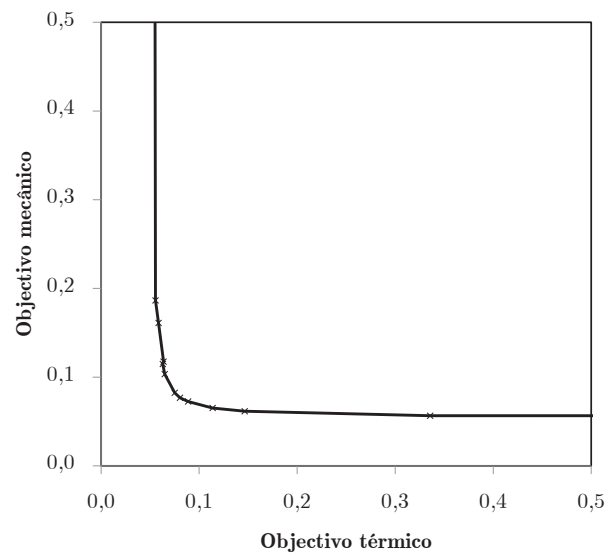


Figura 9.73: Topologias obtidas na resolução de um problema multiobjectivo com peso de ponderação do problema térmico (a)  $w_t = 0$ , (b)  $w_t = 0,1$ , (c)  $w_t = 0,2$ , (d)  $w_t = 0,4$ , (e)  $w_t = 0,6$ , (f)  $w_t = 0,8$ , (g)  $w_t = 0,9$  e (h)  $w_t = 1$ .

Mais uma vez, retoma-se como ilustração o exemplo MBB apresentado ao longo desta secção. Neste caso, adiciona-se um objectivo térmico ao problema original, como ilustrado na figura 9.76. As topologias obtidas, para o caso da malha M4, são apresentadas na figura 9.77 para  $w_t = \{0; 0,2; 0,4; 0,5; 0,6; 0,8; 1\}$ . A evolução de funções-objectivo e curva de Pareto para este problema são apresentadas na figura 9.78. No caso apresentado, o problema térmico tem uma solução ainda aceitável no extremo de optimização mecânica, razão pela qual o pior valor (normalizado) deste objectivo é ainda assim inferior à unidade.



(a)



(b)

Figura 9.74: (a) Funções-objectivo mecânica, térmica e global, e (b) curva de Pareto da resolução de um problema multiobjectivo.

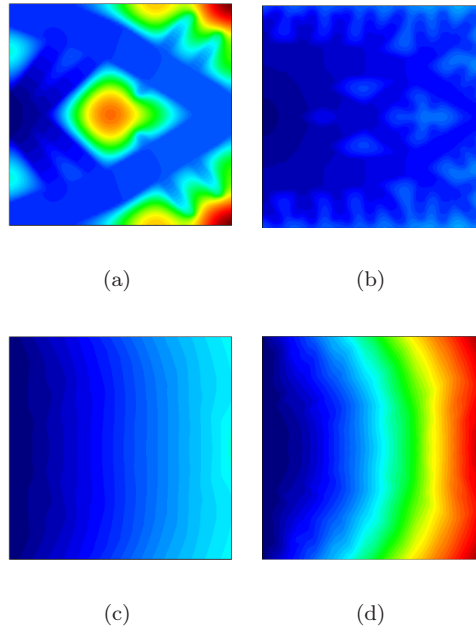


Figura 9.75: Representação dos campos de (a,b) temperaturas e (c,d) deslocamentos para as topologias correspondentes a um peso do objectivo térmico de (a,c)  $w_t = 0,1$  e (b,d)  $w_t = 0,9$ .



Figura 9.76: Representação esquemática do problema térmico a utilizar com o problema MBB numa abordagem multiobjectivo (\* – fonte fria, • – fonte quente).

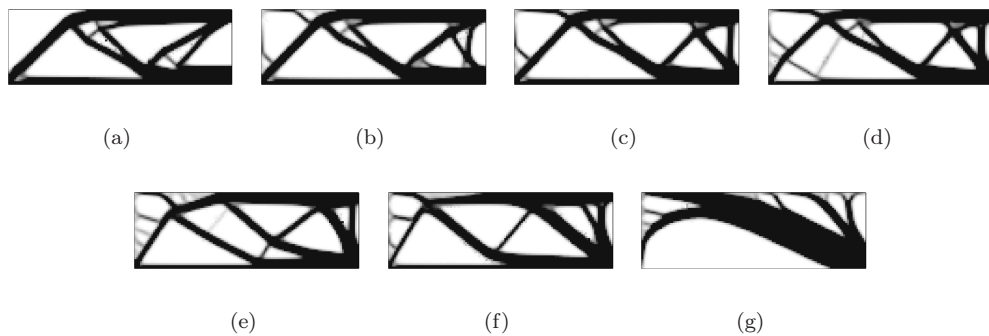
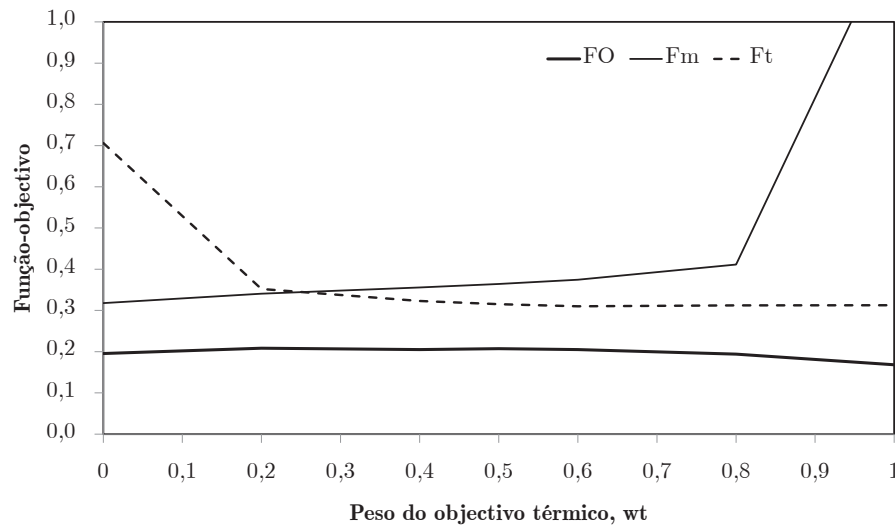
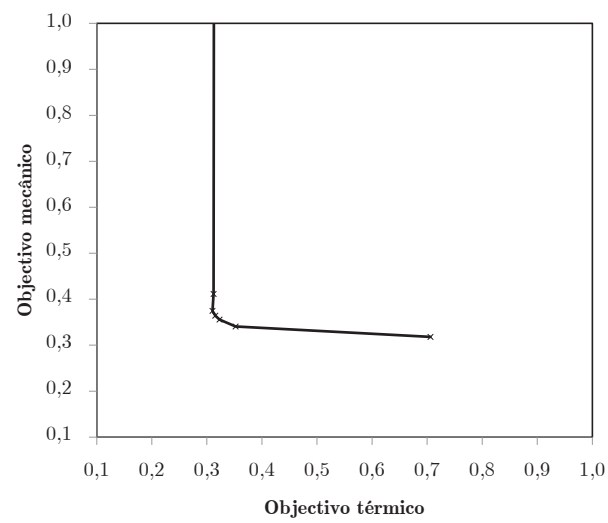


Figura 9.77: Topologias obtidas na resolução de um problema MBB multiobjectivo com peso de ponderação do problema térmico (a)  $w_t = 0$ , (b)  $w_t = 0,2$ , (c)  $w_t = 0,4$ , (d)  $w_t = 0,5$ , (e)  $w_t = 0,6$ , (f)  $w_t = 0,8$  e (g)  $w_t = 1$ .



(a)



(b)

Figura 9.78: Representação das (a) funções-objectivo mecânica, térmica e global, e da (b) curva de Pareto da resolução do problema MBB multiobjectivo.



### 9.3.3.1 Exemplos 3-D

Apresentam-se alguns problemas tridimensionais. Um primeiro exemplo corresponde a um problema de carregamentos m ltiplos [Fernandes 1998]. Utiliza-se uma malha de  $20 \times 20 \times 20$  elementos finitos hexa dricos, representando um quarto do problema com condi  es de fronteira de simetria. Os modos de carga alternativos s o apresentados na figura 9.79, juntamente com as topologias obtidas para a pondera  o do segundo carregamento com  $w_2 = \{0; 0,2; 0,5; 0,8; 1\}$ . A frac  o vol mica imposta    $f_v = 0,5$ .

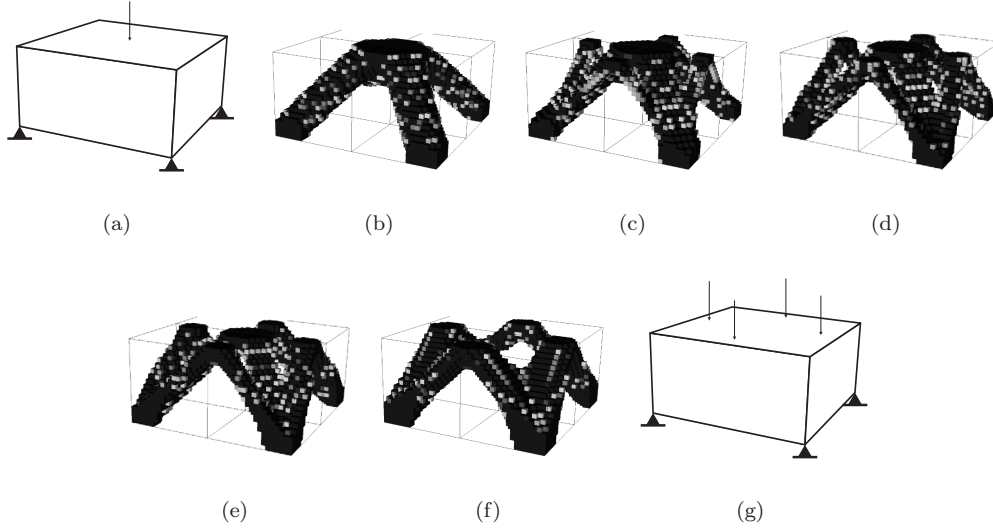


Figura 9.79: Topologias obtidas na resolu  o de um problema tridimensional de carregamentos alternativos, com peso de pondera  o do segundo carregamento (b)  $w_2 = 0$ , (c)  $w_2 = 0,2$ , (d)  $w_2 = 0,5$ , (e)  $w_2 = 0,8$  e (f)  $w_2 = 1$ . Defini  o (a) do primeiro e (g) do segundo carregamento.

Um segundo exemplo corresponde   resolu  o de um problema multiobjectivo, com objectivos mec nico e t rmico [Oliveira *et al.* 2010a]. Utiliza-se uma malha de  $20 \times 40 \times 80$  elementos finitos hexa dricos. Na figura 9.80 apresentam-se os problemas resolvidos e as topologias obtidas na sua resolu  o. Comparam-se ainda com a resolu  o de um problema 2-D equivalente.

Por fim,   semelhan a do problema anterior, resolve-se um problema multiobjectivo mec nico e t rmico [Chen *et al.* 2010]. Resolve-se neste caso apenas um quarto do problema, considerando condi  es de simetria e uma malha de  $80 \times 40 \times 40$  elementos finitos hexa dricos. As diferentes topologias obtidas s o ilustradas na figura 9.81, juntamente com a representa  o dos problemas resolvidos ( $f_v = 0,3$ ). Por uma quest o de visualiza  o, apresentam-se resultados suavizados das topologias obtidas. Chama-se a aten  o neste exemplo para os res duos verificados na topologia da figura 9.81(c), correspondente a  $w_t = 0,2$ . Os focos de densidade superior percept veis nas regi es de vazio correspondem  s instabilidades referidas anteriormente, associadas aos filtros de sensibilidade e ao comportamento da derivada do SIMP em regi es de densidade reduzida.

## 9.4 Optimiza  o Topol  gica Multiescala

Os procedimentos de optimiza  o multiescala estudados neste trabalho actuam ao n vel da microescala, macroescala ou ambas, de acordo com as estrat gias definidas nos Cap tulos 6 e 7 (*vd.* Fig. 6.4). Ao longo desta sec  o abordam-se os modos de c culo base das diferentes abordagens, remetendo para estudos posteriores a an lise de metodologias alternativas. Neste sentido, procede-

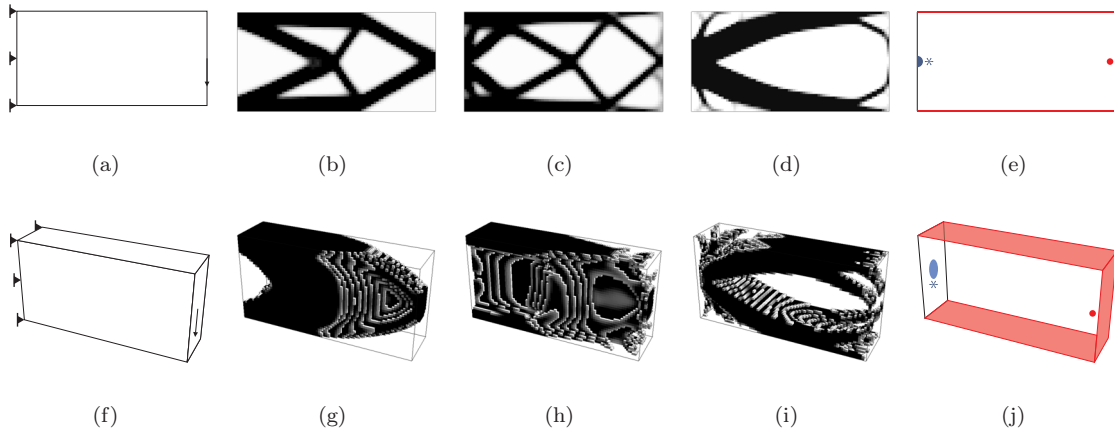


Figura 9.80: Topologias obtidas na resolução de um problema bi- e tridimensional multiobjectivo, de viga encastrada, com peso de ponderação do problema térmico (b,g)  $w_t = 0$ , (c,h)  $w_t = 0,5$  e (d,i)  $w_t = 1$ . Definição do problema (a,f) mecânico e (e,j) térmico (\* – fonte fria, • – fonte quente).

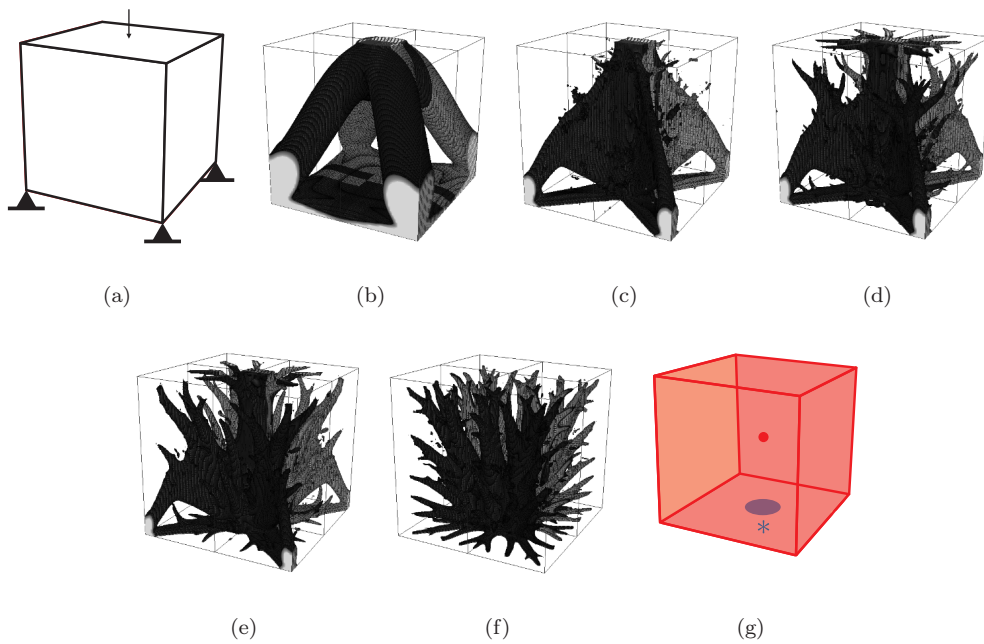


Figura 9.81: Topologias obtidas na resolução de um problema tridimensional multiobjectivo, com peso de ponderação do problema térmico (b)  $w_t = 0$ , (c)  $w_t = 0,2$ , (d)  $w_t = 0,5$ , (e)  $w_t = 0,8$  e (f)  $w_t = 1$ . Definição do problema (a) mecânico e (g) térmico (\* – fonte fria, • – fonte quente).

-se à otimização isolada de material, ao nível da microescala, seguido de otimização isolada da macroescala, com influência de distribuições de constituintes microestruturais prescritas. Por fim, faz-se uma primeira abordagem à otimização simultânea de estrutura e material com estratégias hierárquicas.

### 9.4.1 Otimização de Material

Ao nível da otimização do material constituinte, abordam-se aqui duas estratégias distintas. A abordagem local da otimização topológica consiste na utilização de procedimentos idênticos aos já aplicados neste capítulo, mas recorrendo a condições de fronteira específicas, quer para garantir a periodicidade quer para impor de forma consistente campos de deformação periódicos ou campos de tensão antiperiódicos. Nesta abordagem, as propriedades dos materiais são apenas avaliadas através da homogeneização por expansão assintótica, como parte de pós-processamento (interno). Por sua vez, a homogeneização inversa utiliza a HEA como parte integrante do processo de otimização. Assim, cada iteração envolve não a resolução de um sistema de equilíbrio pelo método dos elementos finitos, mas sim a resolução de diversos sistemas de equações relativas aos problemas de elementos finitos da HEA. Este procedimento é também a base dos procedimentos hierárquicos abordados. Por esta razão, a sequência aqui adoptada difere dos capítulos iniciais. Encara-se a abordagem local como um tipo de procedimento acessório, face à importância mais geral da homogeneização inversa.

#### 9.4.1.1 Abordagem Local

Mostram-se aqui alguns exemplos da utilização das condições de fronteira multigrau-de-liberdade descritas na Secção 7.2.2 [Oliveira *et al.* 2010b]. As células representativas unitárias utilizadas são quadradas e cúbicas, discretizadas com  $20 \times 20$  elementos quadriláteros lineares e  $15 \times 15 \times 15$  elementos hexaédricos lineares, respectivamente. As condições de fronteira utilizadas são impostas recorrendo a um método de penalidade. Os campos impostos são normalizados, utiliza-se uma restrição de volume de  $f_v = 0,5$  e uma penalidade  $p = 4$ . O método de otimização utilizado é o método das assíptotas móveis padrão [Svanberg 1987].

Na figura 9.82 mostram-se resultados para a imposição de um estado de deformação ou de tensão uniaxial num problema 2-D. O problema de imposição de um estado de deformação (Fig. 9.82(a)) resulta de uma deformação<sup>4</sup> macroestrutural homogénea  $\epsilon^0 = \{1,0; 0,0; 0,0\}$ , enquanto que o problema de imposição de tensão (Fig. 9.82(b)) resulta de um campo de tensão macroestrutural  $\sigma^0 = \{1,0; 0,0; 0,0\}$ . As topologias obtidas são idênticas em ambos os casos. Note-se o efeito das condições de fronteira homogéneas utilizadas no caso de imposição de tensão, onde as cargas equivalentes induzem diferentes deslocamentos nas regiões de diferentes densidades. No entanto, a periodicidade é mantida, assim como o valor homogeneizado da deformação da CRU. A carga distribuída resultante do campo de tensão imposto é representado na figura 9.82(c), onde se pode observar o seu carácter antiperiódico. O mesmo pode ser verificado na figura 9.83, onde se representa cada um dos carregamentos mecânicos característicos  $\mathbf{F}^D$  da HEA, assim como as deformadas correspondentes ao respectivos correctores  $\chi$ . As condições de fronteira homogéneas de dois nós levam a que estes deslocamentos característicos sejam periódicos, oscilando de acordo com as variações locais de propriedades dos materiais constituintes que conduzem à obtenção da matriz de elasticidade homogeneizada  $\mathbf{D}^h$ . Para um caso 3D, a resolução de um problema idêntico resultou na distribuição óptima de material representada na figura 9.84. Note-se novamente a antiperiodicidade dos carregamentos equivalentes no caso de imposição de tensão. A utilização das condições de fronteira MFC ao longo de toda a fronteira das CRU dá origem a problemas de condicionamento e estabilidade assinaláveis. O desequilíbrio entre magnitude dos coeficientes das matrizes de rigidez dos problemas devido à utilização de penalidades é acentuado pela influência da penalidade no

<sup>4</sup>Os valores de deformação e tensão impostos ao longo deste capítulo são normalizados. Adicionalmente, são representados segundo a notação matricial de Voigt, considerando-se a definição de deformações de engenharia ( $\gamma_{ij} = 2\epsilon_{ij}$ ) [Fung e Tong 2001].

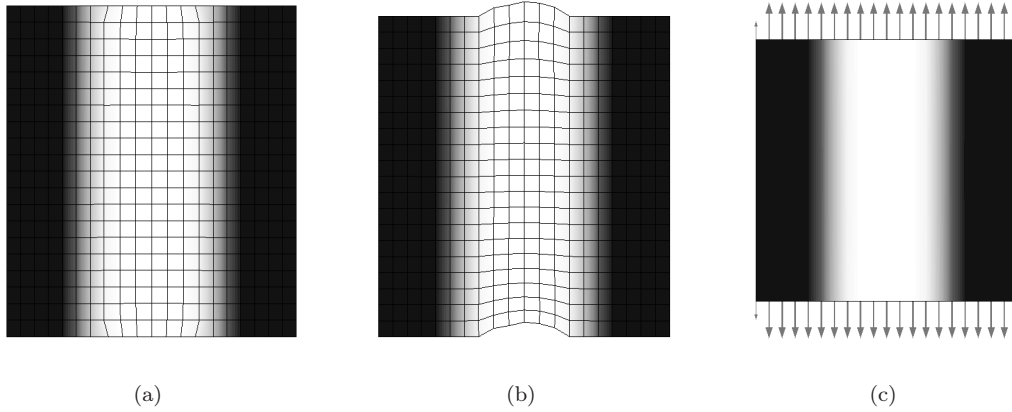


Figura 9.82: Geometria deformada e distribuição óptima de material para a imposição de (a) deformação e (b) tensão uniaxial num problema 2-D. Representação do (c) carregamento equivalente antiperiódico no caso de tensão.

SIMP. Estes problemas de condicionamento são uma séria limitação na resolução destes problemas de optimização, levando a que os tempos de resolução dos sistemas de equações cresçam com o aumento da discrepância entre propriedades dos elementos finitos utilizados.

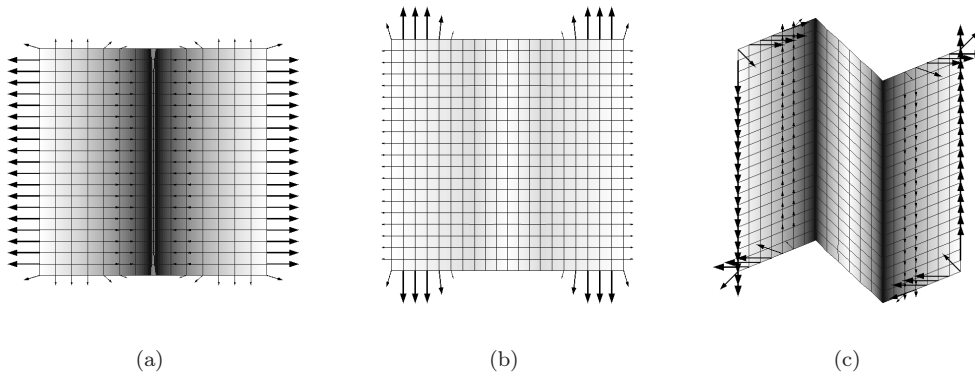


Figura 9.83: Deslocamentos característicos periódicos e carregamentos mecânicos característicos antiperiódicos de uma CRU 2-D: (a)  $\chi_{11}$  e  $\mathbf{F}_{11}^D$ , (b)  $\chi_{22}$  e  $\mathbf{F}_{22}^D$ , e (c)  $\chi_{12}$  e  $\mathbf{F}_{12}^D$ .

Para melhor ilustrar a periodicidade das soluções obtidas, quer em termos de distribuição de material quer em termos de deslocamentos característicos, alguns resultados são apresentados na figura 9.85. Estes mostram as deformadas e distribuição de material com a repetição de CRU resultantes da imposição dos campos homogêneos de deformação  $\bar{\epsilon} = \{1,0; -1,0; 1,0\}$  (Fig. 9.85(a)) e  $\bar{\epsilon} = \{0,0; 0,0; 1,0\}$  (Fig. 9.85(c)). Como exemplo de correctores oriundos da aplicação da HEA a estas CRU, mostra-se o corrector  $\chi_{12}$  (Fig. 9.85(b)) para o primeiro caso e  $\chi_{22}$  (Fig. 9.85(d)) para o segundo. Note-se a periodicidade da distribuição de material resultante. É ainda notória a diferença entre o resultado da utilização de condições de fronteira homogêneas de dois nós da HEA e as condições de fronteira não-homogêneas de três nós utilizadas no procedimento geral. Enquanto que as primeiras permitem apenas oscilações em torno de um estado médio, com vértices fixos, as

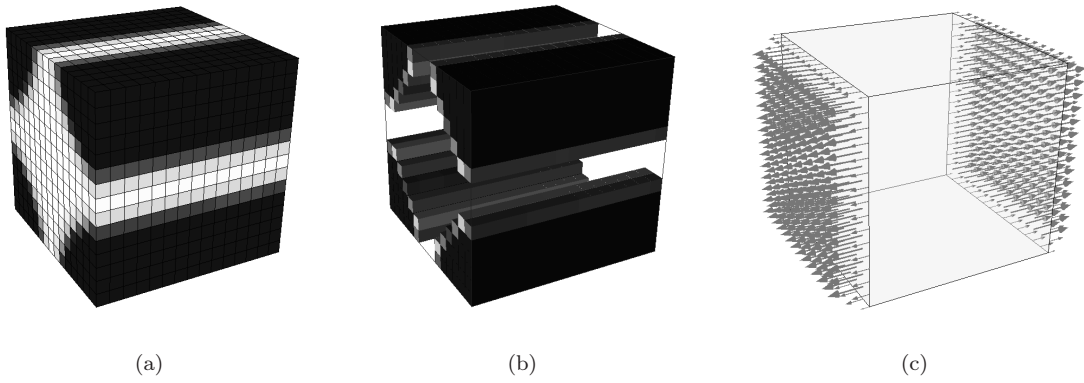


Figura 9.84: (a,b) Distribui  o   tima de material para um problema de trac  o uniaxial 3-D e (c) correspondente carregamento antiperi  dico para o caso de imposi  o de um campo de tens  o.

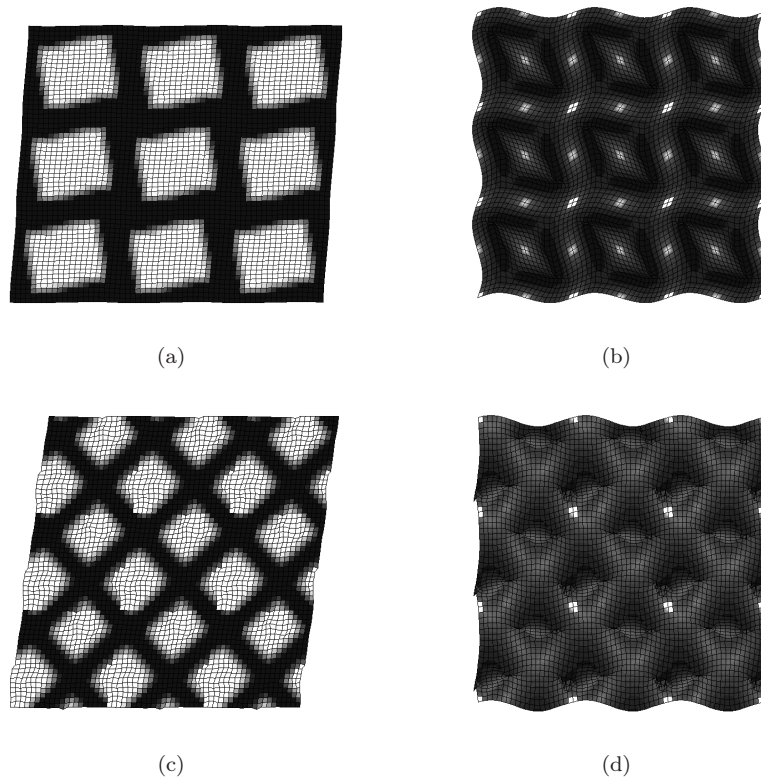


Figura 9.85: Ilustra  o de periodicidade para a repeti  o de CRU quadradas com imposi  o de condi   es de fronteira homog  neas e n  o-homog  neas: (a) deformada com distribui  o   tima de material para  $\bar{\epsilon} = \{1, 0; -1, 0; 1, 0\}$  e (b) deslocamentos caracter  sticos  $\chi_{12}$ , (c) deformada com distribui  o   tima de material para  $\bar{\epsilon} = \{0, 0; 0, 0; 1, 0\}$  e (d) deslocamentos caracter  sticos  $\chi_{22}$ .

condições mais gerais permitem a deformação global da CRU, mantendo a periodicidade.

No contexto desta metodologia, apresentam-se ainda exemplos de aplicação 2-D multiobjectivo [Oliveira *et al.* 2010b]. Utiliza-se aqui uma malha de  $80 \times 80$  elementos finitos quadriláteros lineares. São impostos campos homogêneos de tensão,  $\bar{\varepsilon} = \{1,0;0,0;0,0\}$ , e de calor superficial,  $\bar{q} = \{0,0;1,0\}$ , tendendo cada um a gerar fases dominantes alinhadas segundo uma direcção ortogonal. Assim, utiliza-se o peso  $w_t$  para controlar o peso do problema térmico na ponderação de objectivos mecânico e térmico. Refira-se que os extremos podem conduzir a singularidades para o objectivo complementar. Como a fase de vazio não é efectivamente de densidade nula, é possível controlar a dificuldade de convergência nestes limites. Mostra-se na figura 9.86 a variação dos objectivos com a ponderação do problema térmico. A figura 9.87, por sua vez, mostra uma curva de Pareto para este problema, juntamente com as topologias obtidas. É neste caso perceptível a variação da orientação dominante de material com a transição entre objectivos. A variação das propriedades equivalentes (homogeneizadas) das soluções obtidas é ilustrada nas figuras 9.88. Denotam-se dois detalhes a este nível. A variação dos módulos de elasticidade e coeficientes de condutividade térmica tem variações abruptas de tendência junto aos limites. Isto acontece pelo facto de o material se tornar desconexo nos extremos, levando a uma queda abrupta das propriedades transversais. Motivado pelo mesmo efeito, os coeficiente de expansibilidade térmica mantêm-se num patamar idêntico à propriedade do material de base exceptuando quando deixa de haver continuidade de material em dada direcção. Este comportamento é esperado, sendo o coeficiente de expansibilidade térmica em materiais celulares (material e vazio) idêntico ao coeficiente do material excepto quando este é desconexo [Bendsøe e Sigmund 2003]. Campos característicos são apresentados na figura 9.89, para o caso de  $w_t = 0,4$ . Na figura 9.90 apresenta-se a topologia óptima e campos característicos são ilustrados para um problema multiobjectivo 3-D ( $\bar{\sigma} = \{1,0; -1,0;0,0;0,0;0,0;0,0\}$  e  $\bar{q} = \{0,5;0,25;1,0\}$ , com  $w_t = 0,5$ ).

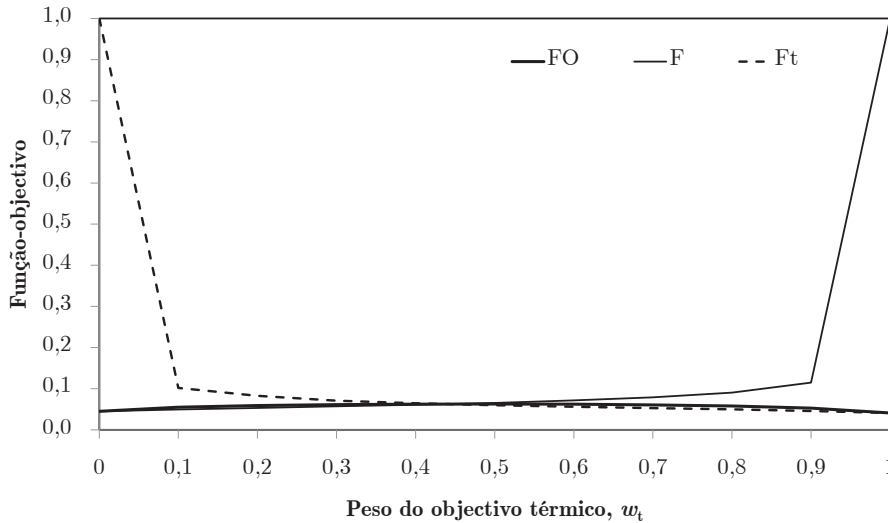


Figura 9.86: Variação das funções-objectivo mecânica, térmica e total com  $w_t$  num problema de optimização local multiobjectivo.

#### 9.4.1.2 Homogeneização Inversa

A metodologia de resolução anterior é válida para a optimização local de material, com a virtude de poder ser implementada com poucas alterações face a um programa genérico de optimização topológica macroestrutural. No entanto, apresenta algumas limitações, nomeadamente na integração em processos de cálculo mais complexos (*e.g.* optimização multiescala) ou nas dificuldades de

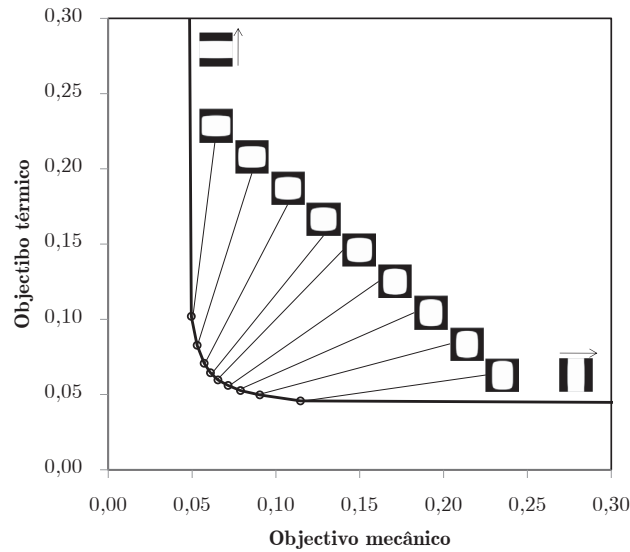


Figura 9.87: Curva de Pareto num problema de optimização local multiobjectivo.

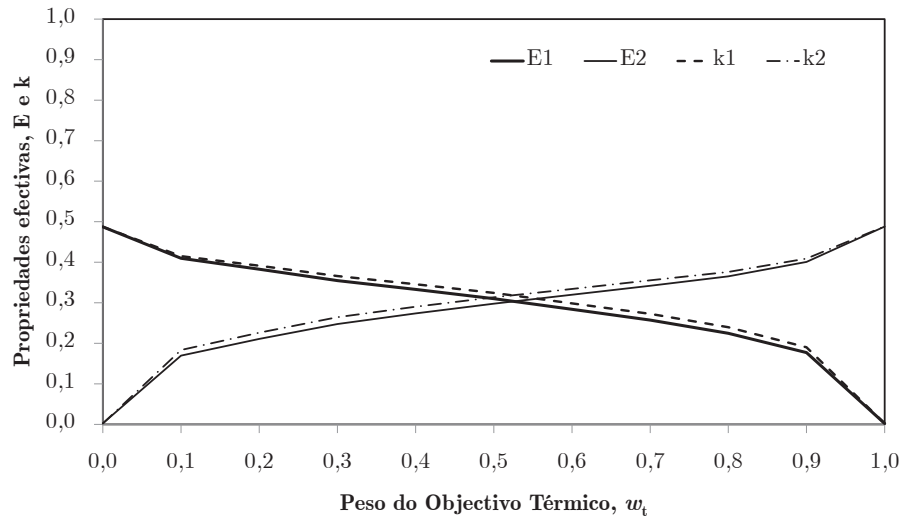
convergência do sistema de resolução de equações em algumas aplicações (*e.g.* em problemas com fases desconexas de material). A metodologia que se apresenta em seguida, em contrapartida, é formulada em torno da própria informação constitutiva do material (*vd.* Cap. 6). A homogeneização inversa apresenta-se como uma técnica que permite não só a optimização de material mas também uma natural integração em diferentes procedimentos multiescala. Aborda-se aqui a sua aplicação ao problema de cálculo multiobjectivo apresentado anteriormente, prosseguindo-se depois com a análise de algumas questões numéricas associadas à sua aplicação.

O problema multiobjectivo da secção anterior é aqui resolvido com o método das assíptotas móveis, na sua configuração padrão. Resolve-se este problema sem nenhuma técnica de controlo de instabilidades numéricas (Fig. 9.91) e depois com a utilização de um filtro de sensibilidades (Fig. 9.92). À semelhança da maioria dos problemas resolvidos neste capítulo, utiliza-se um filtro de conectividade (F2) com um raio  $\bar{R}_f = 1,25$ .

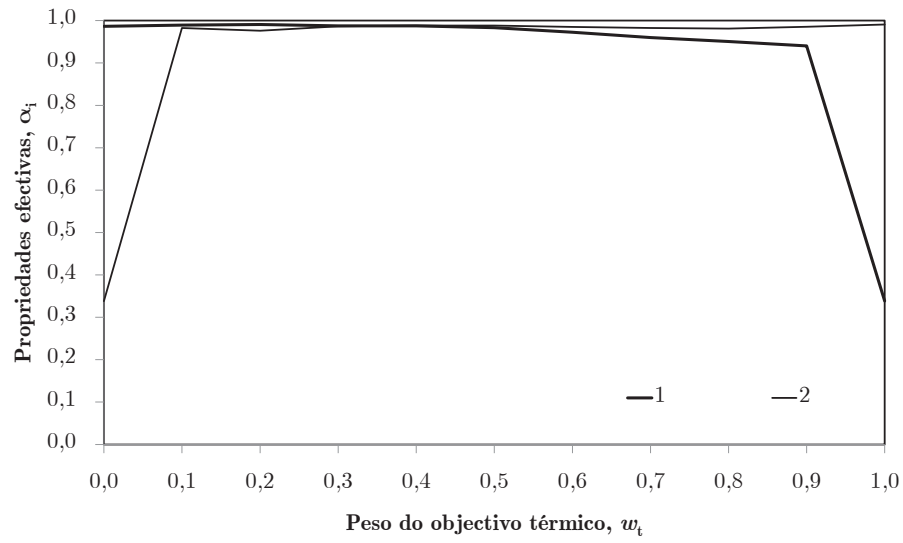
Na figura 9.93 ilustra-se o efeito verificado nos extremos. Tomando como exemplo o caso de  $w_t = 0,2$ , observa-se que existe uma tendência inicial para gerar uma topologia com elementos de ligação vertical. No entanto, esta tendência é gradualmente anulada pelo efeito do filtro, já que a espessura reduzida destas ligações é fortemente afectada pela influência do filtro e, conseqüentemente, das regiões vizinhas de densidade reduzida. A influência deste efeito é dependente do grau de refinamento de malha, assim como da agressividade do método de actualização de variáveis utilizado e do tipo de controlo de instabilidade utilizado. Constatase que o problema não-filtrado é menos sensível a esta questão. Comparando com a optimização local, potencialmente pelas diferenças no tipo de condições de fronteira e na deformação da célula unitária, observa-se que esta é menos sensível a este efeito.

Mostra-se na figura 9.94 a variação da anisotropia mecânica das topologias obtidas com a variação do peso do problema térmico. Note-se que no extremo do problema puramente térmico, o módulo de elasticidade na direcção da solicitação mecânica é praticamente nulo. É por esta razão que a metodologia anterior, de optimização local, tem sérios problemas de convergência para o problema mecânico neste caso. Na realidade, a existência de uma fase de material com uma reduzida rigidez nesta a separar as fases de material com densidade  $\rho = 1$  leva a que estas actuem como se fossem desconexas, reduzindo drasticamente a rigidez e tornando as equações que a definem nesta direcção tendencialmente linearmente dependentes.





(a)



(b)

Figura 9.88: Variação (a) do coeficiente de condutividade térmica,  $k$ , e do módulo de Young,  $E$ , e (b) do coeficiente de expansibilidade térmica,  $\alpha$ , com o peso do objetivo térmico,  $w_t$ .



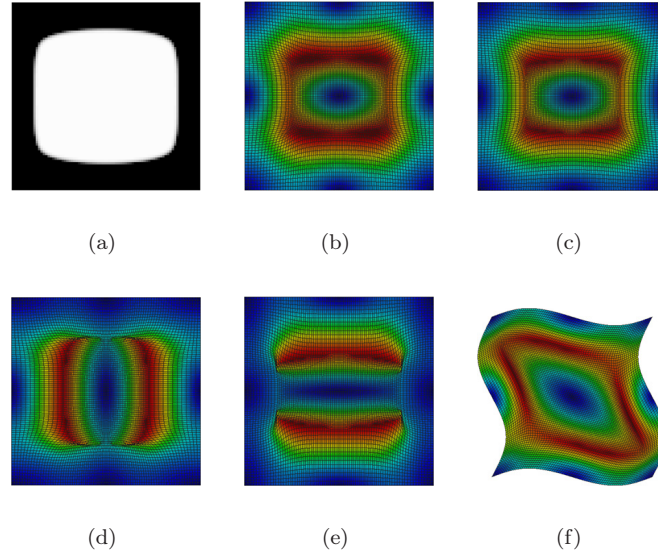


Figura 9.89: Problema de optimização local 2-D: (a) distribuição óptima de material e (b) deslocamentos termocaracterísticos,  $\Upsilon$ , (c) campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva,  $\Psi$ , e (d-f) deslocamentos característicos,  $\chi_{11}$ ,  $\chi_{22}$  e  $\chi_{12}$  ( $w_t = 0,4$ ).

#### 9.4.1.3 Detalhes Numéricos

Pretende-se nesta secção avaliar a influência de alguns parâmetros e configurações na resolução de problemas de homogeneização inversa. Para isso, recorre-se a alguns problemas típicos para análise. Antes de avançar a este nível, no entanto, procede-se a uma comparação preliminar de métodos de resolução. Assim, recorrendo à mesma malha dos problemas anteriores, de  $80 \times 80$  elementos finitos quadriláteros lineares, resolve-se um problema com imposição de um estado de deformação macroestrutural de  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$  [Bendsøe e Sigmund 1999]. Mostra-se nas figuras 9.95 a topologia obtida, com o filtro F2, e o comportamento das funções-objectivo utilizando o MMA ( $s_0$  variável,  $s_0 = 0,1$  e  $s_0 = 0,9$ ), método de critério de óptimo (OC) e CONLIN. A topologia, por um lado, é perfeitamente coincidente em qualquer um dos casos, assim como o comportamento homogeneizado do material obtido. As funções-objectivo, por outro lado, apresentam comportamentos coerentes com as análises efectuadas anteriormente. Os métodos derivados do MMA, variam entre a progressividade da versão de limite de actualização mais apertada  $s_0 = 0,9$  e a maior agressividade mas maior instabilidade também da versão original com  $s_0 = 0,1$ . Esta é, aliás, a única que apresenta alguma instabilidade numa fase mais avançada do cálculo. Consta-se ainda a estabilidade e progressividade dos métodos OC e CONLIN. O comportamento apresentado neste exemplo observa-se também para outros problemas. Assim, seguindo uma abordagem coerente com o já apresentado, utiliza-se na generalidade dos problemas o método MMA padrão.

Segue-se uma análise de dependência de malha. Para o efeito, recorre-se a malhas de  $10 \times 10$ ,  $20 \times 20$ ,  $30 \times 30$ ,  $40 \times 40$ ,  $50 \times 50$ ,  $60 \times 60$ ,  $70 \times 70$  e  $80 \times 80$  elementos finitos quadriláteros lineares. Resolvem-se os problemas de imposição de deformações macroestruturais  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1\}^T$  (vd. Fig. 9.96),  $\bar{\varepsilon} = \{1; 0; 0\}^T$  (vd. Fig. 9.97),  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$  (vd. Fig. 9.98) e  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 0\}^T$  (vd. Fig. 9.99). Algo que se torna rapidamente aparente é a tendência para a simplicidade das soluções. Naturalmente lógico para problemas simples como os apresentados, esta é uma tendência que se verifica regularmente nesta metodologia e que é claramente desejada ao trabalhar com materiais compósitos. Por esta razão, constata-se que a utilização de metodologias como controlo de perímetro ao nível da microescala, quando processada isoladamente, não traz resultados

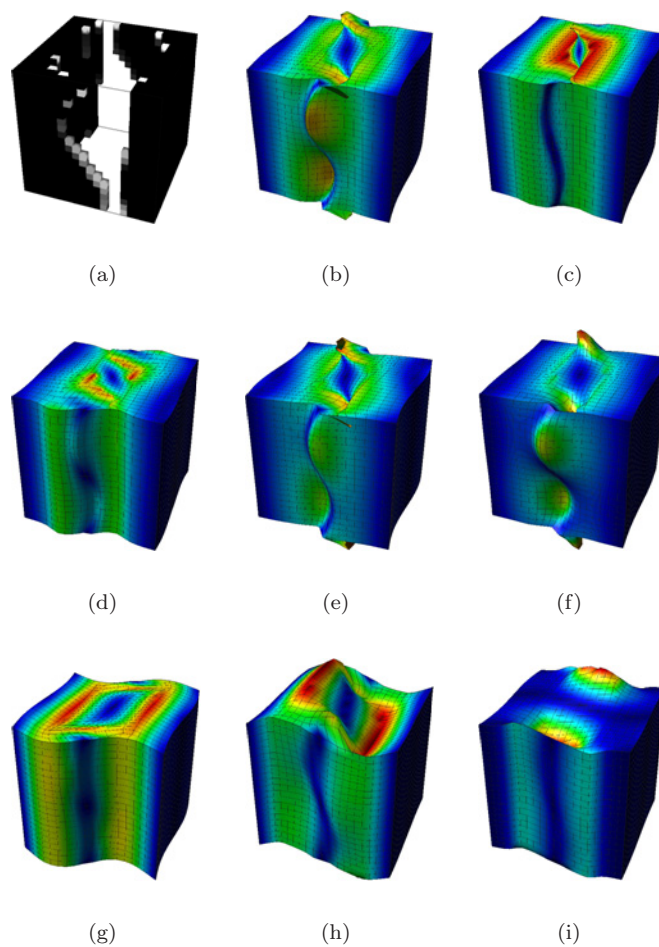


Figura 9.90: Exemplo de problema de optimização local 3-D: (a) distribuição óptima de material e (b) deslocamentos termocaracterísticos,  $\Upsilon$ , (c) campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva,  $\Psi$ , e (d-i) deslocamentos característicos,  $\chi_{11}$ ,  $\chi_{22}$ ,  $\chi_{33}$ ,  $\chi_{12}$ ,  $\chi_{23}$  e  $\chi_{13}$  ( $w_t = 0,5$ ).

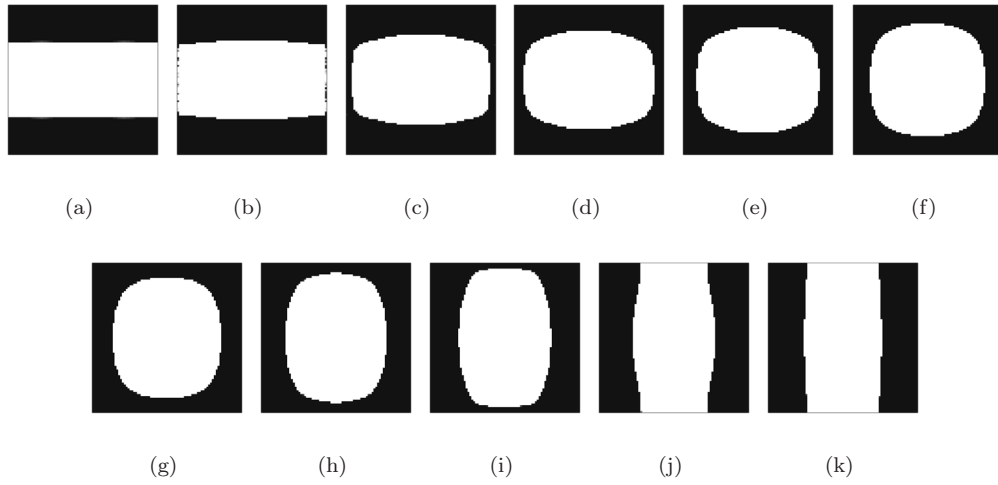


Figura 9.91: Resolução de problema de homogeneização inversa multiobjectivo, com um peso do problema térmico de  $w_t = 0,0; 0,1; \dots; 1,0$ , sem recurso a controlo de estabilidade.

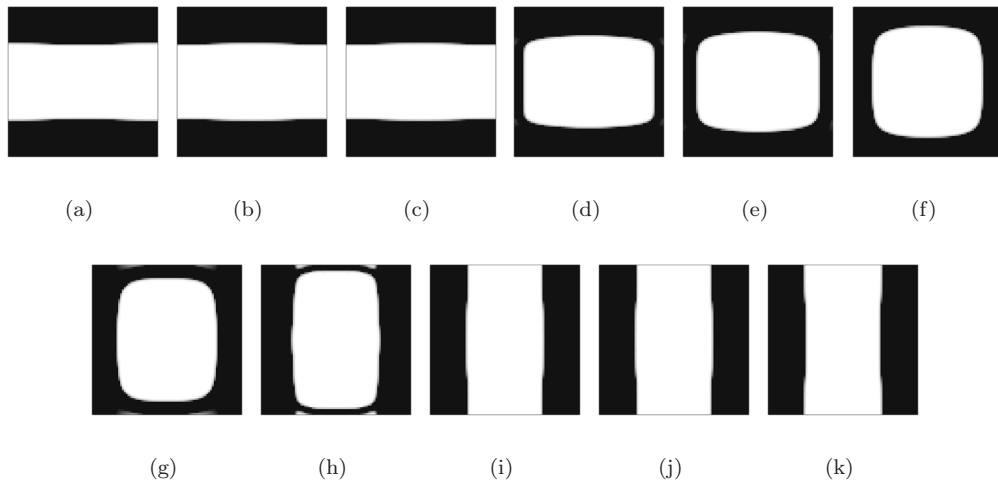


Figura 9.92: Resolução de problema de homogeneização inversa multiobjectivo, com um peso do problema térmico de  $w_t = 0,0; 0,1; \dots; 1,0$ , utilizando um filtro de sensibilidades.

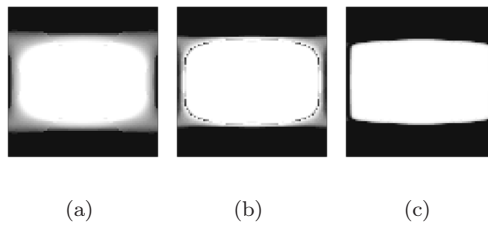


Figura 9.93: Ilustração de iterações intermédias na evolução de um problema de homogeneização inversa multiobjectivo com  $w_t = 0,2$ : (a)  $i = 6$ , (b)  $i = 9$  e (c)  $i = 22$ .

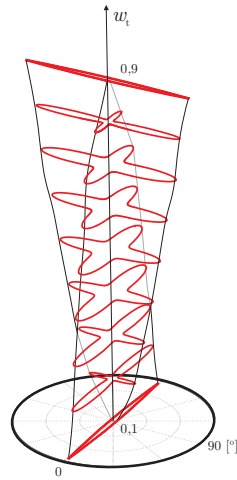
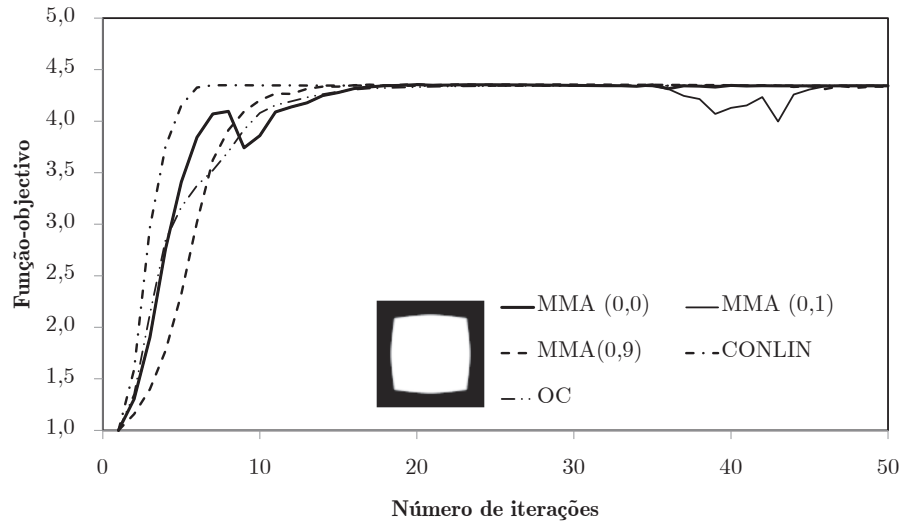


Figura 9.94: Variação do coeficiente de elasticidade em função da orientação e do peso do problema térmico,  $w_t$ , num problema de homogeneização inversa multiobjectivo.



(a)

Figura 9.95: Evolução inicial da função-objectivo utilizando diferentes métodos na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ .

relevantes nesta aplicação. Em contrapartida, abordagem não adoptada neste trabalho, é possível o recurso a este tipo de metodologia impondo limites mínimos de perímetro quando o objectivo é de aumentar o detalhe e a complexidade das microestruturas (*e.g.* aplicações biomecânicas ao nível da microestrutura óssea [Coelho *et al.* 2008a]). No entanto, esta abordagem, mesmo com controlo simultâneo com técnicas de filtragem, acarreta algum ruído sob a forma de padrões *checkerboard*, que numericamente aumentam o perímetro/superfície. No caso deste trabalho, verifica-se ainda que a homogeneização inversa se apresenta muito mais estável que o modelo geral macroestrutural para este tipo de problemas. A tendência para a existência de fenómenos *checkerboard* é muito menor, em muitos casos aparecendo apenas de forma ténue em problemas 3-D. Por sua vez, dependência de malha é menos evidente, observando-se que as diferenças ao nível do detalhe das topologias se verificam não tanto na existência de diferentes elementos estruturais, mas mais ao nível do refinamento da sua geometria. Estas questões estão intimamente ligadas à forma como as condições de fronteira são aplicadas, assim com à sua natureza. Por um lado, os campos impostos são homogêneos e constantes em toda a malha quando o material é homogêneo também. Por outro lado, ao contrário do caso anterior, o facto de não haver uma deformação global da CRU leva a que as oscilações impostas pelos sistemas de equações HEA e as consequentes sensibilidades tendam a manter a simplicidade das soluções obtidas.

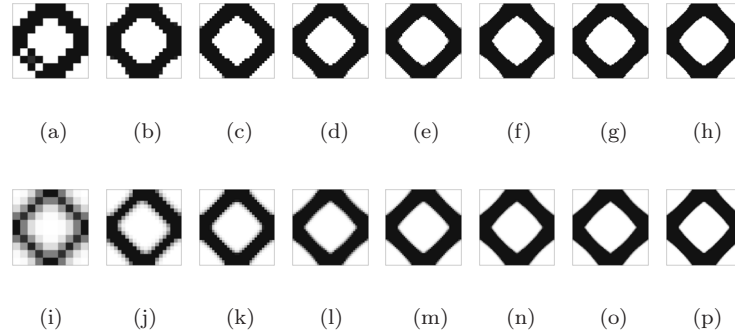


Figura 9.96: Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: (a-h) sem filtragem e (i-p) com filtragem de sensibilidades.

Uma clara contradição à observação anterior surge para o caso do problema  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 0\}^T$  com filtro. Neste caso, verifica-se uma tendência para passar pela solução esperada, coerente com a solução não-filtrada, e depois oscilar em torno de soluções com objectivos menos favoráveis. Esta evolução pode observar-se na figura 9.100, tomando como exemplo a malha  $50 \times 50$ . Nesta figura apresenta-se a função-objectivo e uma evolução do módulo de elasticidade  $E_{11}$  normalizado com o módulo de elasticidade do material de base  $E_0$ , tomando como referência as iterações 9, 15, 43, 70, 105, 153, 179 e 200. A função-objectivo atinge o seu valor máximo numa fase inicial do processo iterativo ( $i = 15$ ). Constata-se, no entanto, uma tendência para ir gradualmente acrescentando detalhe à solução. Esta tendência é semelhante em praticamente todos os níveis de refinamento de malha, dependendo apenas do nível de detalhe possível dada a resolução da malha e do critério de paragem utilizado. Nos resultados apresentados para este problema todos os refinamentos com a excepção do caso de  $10 \times 10$  elementos atingiram o número máximo de iterações estipulado (200).

A instabilidade verificada para o referido problema pode ser interpretada da seguinte forma. A única topologia que se aproxima da solução inicial corresponde à iteração 70, onde a rigidez máxima é bastante reduzida face à solução prevista e à rigidez do material de base. Contudo, a função de energia de deformação avaliada com a função-objectivo é praticamente máxima neste ponto. A justificação para tal pode obter-se analisando as figuras 9.101. Constata-se que o com-

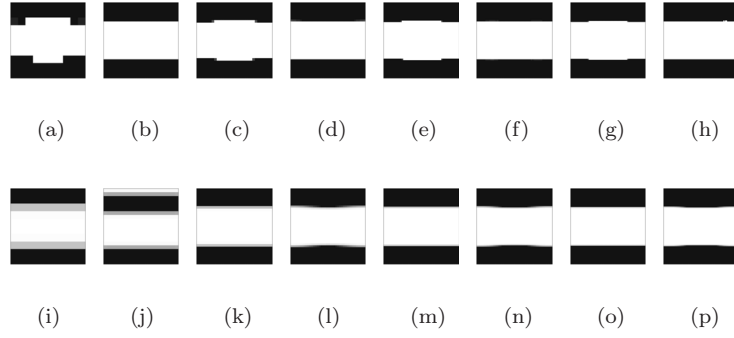


Figura 9.97: Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\epsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: (a-h) sem filtragem e (i-p) com filtragem de sensibilidades.

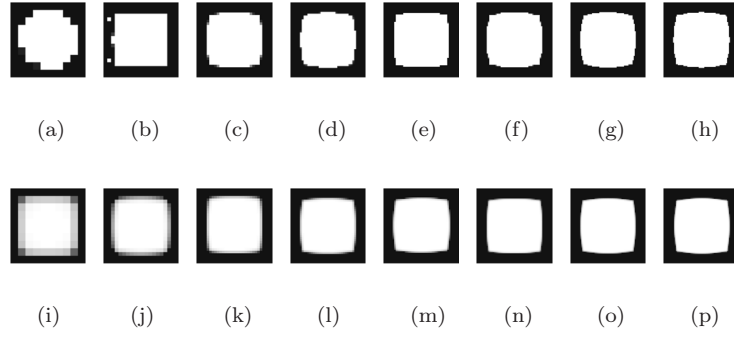


Figura 9.98: Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: (a-h) sem filtragem e (i-p) com filtragem de sensibilidades.

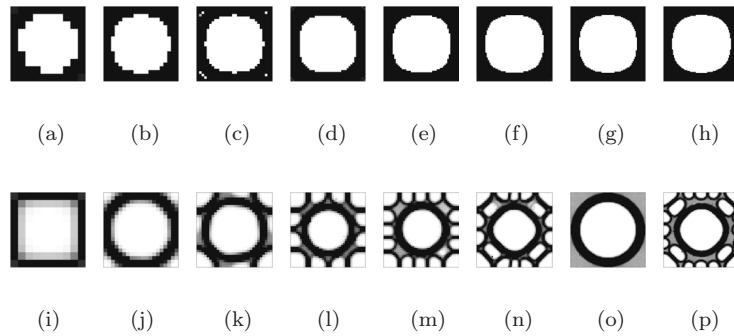
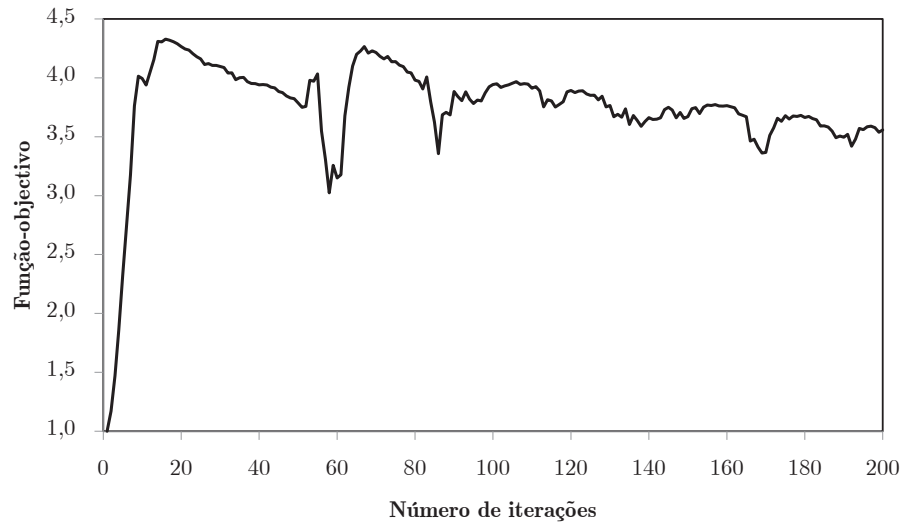
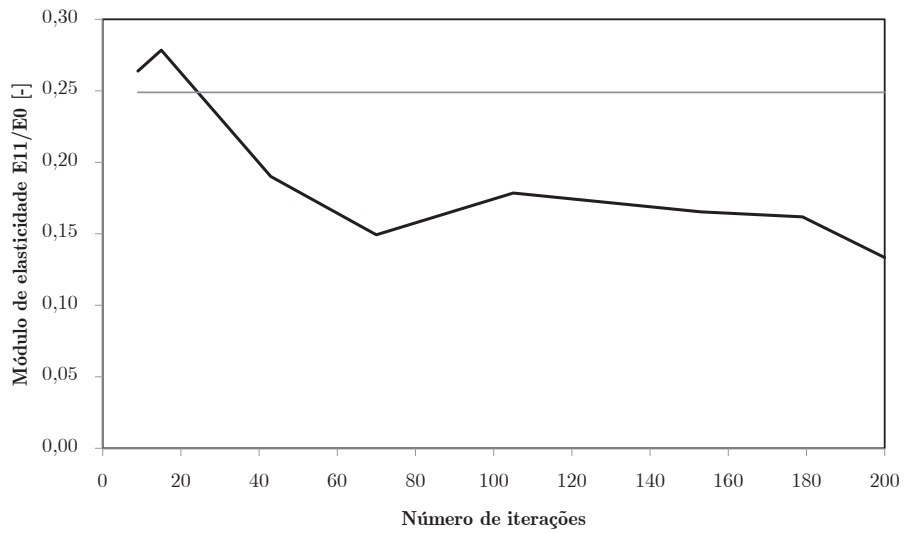


Figura 9.99: Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: (a-h) sem filtragem e (i-p) com filtragem de sensibilidades.



(a)



(b)

Figura 9.100: Divergência na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural  $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ : (a) evolução da função-objectivo e (b) variação do módulo de elasticidade  $E_{11}$  normalizado.

portamento do material obtido nesta iteração é aproximadamente isotrópico. No entanto, devido à existência de regiões de densidade intermédia e à sua consequente penalização, estas são processadas na procura de uma solução discreta. Esta tendência, aliás, é patente ao longo de todo o processo iterativo até que, aumentando o limite de iterações, o limite de resolução da malha tende a criar instabilidades e desequilíbrios de distribuição de material que deterioram as soluções. A tendência aparente é de oscilar em torno de soluções concorrentes que tentam responder ao objectivo pelo meio de maximização de rigidez nas direcções impostas ou de resposta a um estado aparentemente hidrostático com um material de comportamento isotrópico. Estas oscilações são parcialmente originadas pelas técnicas de filtragem. Ao relaxarem os problemas, os filtros atrasam a estabilização das soluções. Em todos os casos apresentados, independentemente da solicitação, a solução sem filtro é atingida em muito poucas iterações, fruto da forte penalização de densidades intermédias e actualização agressiva das variáveis. Refira-se ainda que, para além das diferentes alternativas de filtro de sensibilidade, foram também testados filtros de densidade. No entanto, o seu funcionamento tende a destruir a periodicidade das topologias obtidas. Isto deve-se ao facto de não contemplarem as densidades das CRU vizinhas. Para o efeito, seria necessário contabilizar também a influência das regiões de fronteira que definem a periodicidade.

Uma questão relevante na análise do comportamento das metodologias apresentadas prende-se com a solução inicial utilizada [Bendsøe e Sigmund 2003, Guedes *et al.* 2003, Guest e Prévost 2007, Coelho 2009]. Na figura 9.102 mostram-se as principais alternativas implementadas neste trabalho. Em qualquer um dos casos, as topologias iniciais são geradas automaticamente de modo a corresponder ao padrão desejado e a manter a restrição de volume activa. Note-se que o algoritmo de geração de soluções iniciais implementado neste trabalho actua independentemente do tipo de elemento finito ou célula unitária utilizados, em problemas 2-D ou 3-D. Destacam-se alguns exemplos. A figura 9.102(a) corresponde à solução inicial de densidade constante, semelhante à utilizada em problemas macroestruturais. A solução apresentada na figura 9.102(d) é utilizada preferencialmente neste trabalho e corresponde a um gradiente entre a densidade mínima no interior e a máxima no exterior, posteriormente ajustado para corresponder à fracção de volume pretendida. Na figura 9.102(f) mostra-se um exemplo da opção de solução inicial definida pelo utilizador, neste caso correspondente à solução de um problema anterior. De entre opções de teste menos convencionais, a figura 9.102(g) ilustra uma opção de variação de acordo com a numeração de elementos e a figura 9.102(h) a opção classificada aqui de nucleação aleatória. Neste caso, gera-se aleatoriamente uma zona de densidade elevada para desestabilizar o problema e facilitar o arranque do processo de actualização. Este é, aliás, um dos pontos essenciais neste tipo de análise. Os campos constantes que advêm da imposição de estados de deformação macroestruturais ao nível de microescalas com uma fase única de material dão origem a campos localizados e sensibilidades constantes. Assim, é necessário algum tipo de desequilíbrio numérico ou variação artificial dos campos iniciais para se obter alguma resposta dos métodos de optimização utilizados. Esta questão é mais evidente se a penalização do SIMP for reduzida, razão pela qual se utilizam aqui penalidades elevadas, assim como mais crítica na abordagem local apresentada na secção anterior.

Ilustram-se estes fenómenos analisando a resposta da optimização a uma solução inicial de densidade homogénea. Neste caso, em condições normais, o algoritmo pára muito rapidamente na mesma solução, pelo facto de não ocorrer nenhuma alteração. O problema do campo homogéneo leva a que as sensibilidades sejam constantes em toda a malha de elementos finitos e não haja forma de actualizar as variáveis sem ser em bloco. A actuação simultânea e idêntica em todas as variáveis é impedida pelo facto de a única forma de melhorar o objectivo ser desrespeitando a restrição de volume. Assim, é necessário existir algum tipo de nucleação numérica<sup>5</sup> [Pantz e Trabelsi 2007]. Uma forma pouco robusta de o fazer corresponde a gerar voluntariamente erros de aproximação nos sistemas de equações, criando flutuações artificiais nos campos de deslocamentos característicos. Na figura 9.103 mostra-se um exemplo, comparando o resultado da resposta a uma solicitação uniaxial com uma tolerância do método do gradiente conjugado de  $10^{-4}$  e com uma tolerância de

---

<sup>5</sup>O termo nucleação é aqui utilizado num sentido semelhante ao sentido físico, onde é necessário um pequeno desequilíbrio para iniciar um dado processo em condições estáveis e homogéneas.



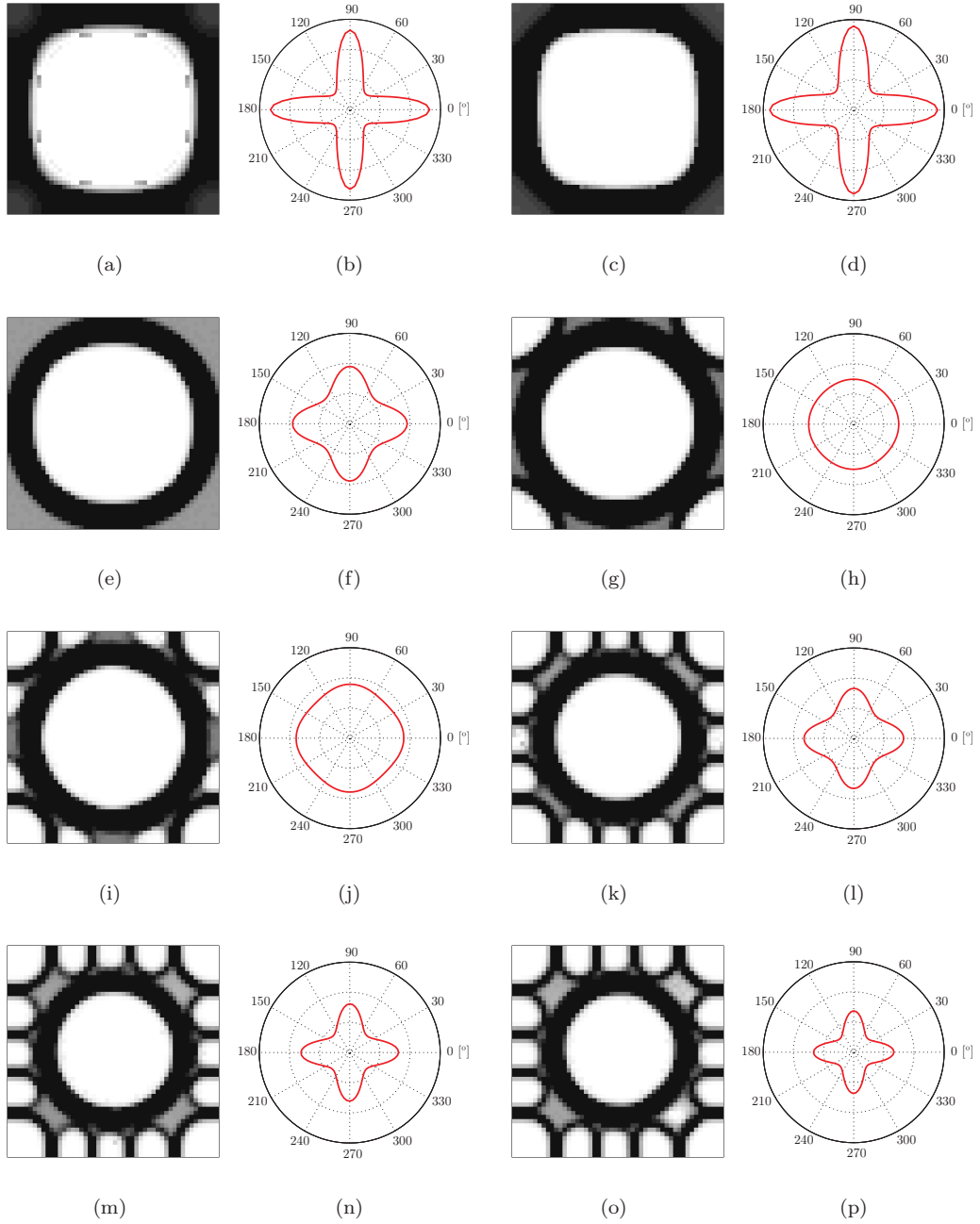


Figura 9.101: Diverg ncia na resolu  o de um problema de homogeneiza  o inversa com imposi  o de uma deform  o macroestrutural  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ : topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para as itera  es (a, b) 9, (c, d) 15, (e, f) 43, (g, h) 70, (i, j) 105, (k, l) 153, (m, n) 179 e (o, p) 200.

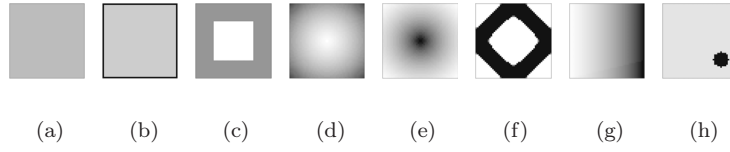
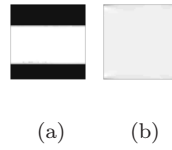
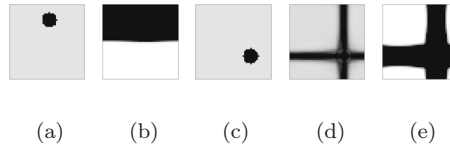


Figura 9.102: Soluções iniciais alternativas para problemas locais.

$10^{-6}$ . Apesar de se utilizar neste caso uma penalidade de  $10^4$ , onde se esperaria uma tolerância mínima de  $10^{-8}$ , mesmo com  $10^{-6}$  os campos obtidos ainda são demasiado estáveis para promover a actualização das variáveis de optimização. No entanto, a tolerância mais relaxada origina uma solução que, apesar de equivalente à solução esperada, parece desviada quando comparada com soluções apresentadas anteriormente. De uma forma mais controlada, este é o efeito que se pretende analisar com a solução inicial de nucleação aleatória. Nas figuras 9.104(a) e (b) mostra-se a solução inicial do problema uniaxial anterior e a topologia obtida, respectivamente. No caso de corte apresentado anteriormente, as figuras 9.104(c), (d) e (e) mostram uma nova solução inicial, a fase de nucleação da solução e a topologia obtida, respectivamente. Outros exemplos são ilustrados na figura 9.105, onde se podem ver as soluções obtidas nos problemas de  $\bar{\varepsilon} = \{0, 0, 1\}$  e  $\bar{\varepsilon} = \{1, -1, 0\}$  com diferentes soluções iniciais.


 Figura 9.103: Soluções obtidas a partir de uma solução inicial homogénea com tolerância de resolução de sistema de (a)  $10^{-4}$  e (b)  $10^{-6}$ .

 Figura 9.104: Ilustração da influência de uma solução inicial de nucleação aleatória: (a,b)  $\bar{\varepsilon} = \{1; 0; 0\}^T$  e (c-e)  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ .

A periodicidade das soluções obtidas, assim como a ilustração de que correspondem efectivamente às mesmas microestruturas, apresenta-se na figura 9.106. Refira-se, contudo, que é necessário algum cuidado com a utilização de diferentes soluções iniciais. Para além de poder em alguns casos resultar em soluções efectivamente diferentes, em algumas situações a solução inicial pode dar origem a problemas de estabilidade. A título de exemplo, mostram-se na figura 9.107 dois casos de nucleação aleatória sem filtragem de sensibilidades. No primeiro caso, de um problema uniaxial, a proximidade do ponto de nucleação da fronteira e a garantia de periodicidade dá origem a detalhes locais inesperados. No segundo caso, biaxial, ocorre um fenómeno generalizado de *checkerboard* e a uma excessiva rigidez artificial da solução.

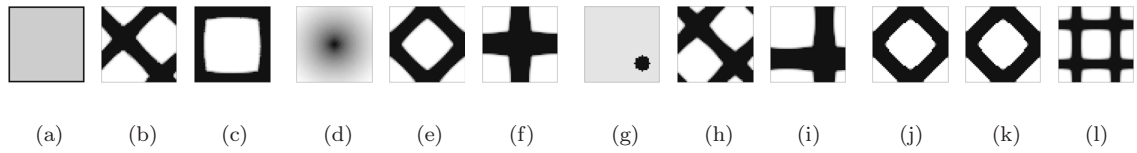


Figura 9.105: Ilustra  o da influ ncia de solu  es iniciais alternativas na homogeneiza  o inversa: (a,d,g,j) solu  es iniciais, (b,e,h,k) topologias obtidas para  $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$  e (c,f,i,l) topologias obtidas para  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ .

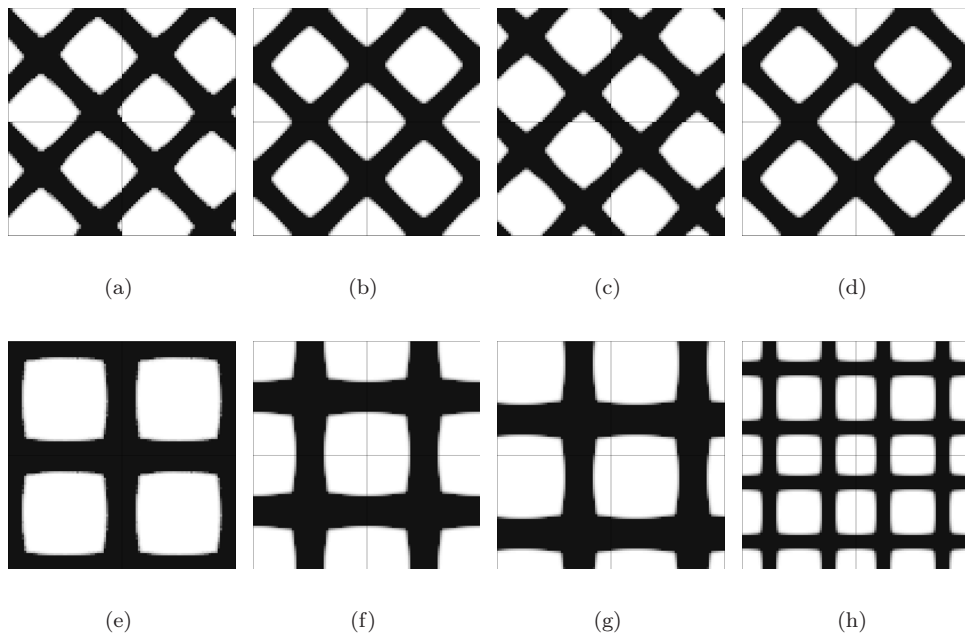


Figura 9.106: Ilustra  o da influ ncia de solu  es iniciais alternativas na homogeneiza  o inversa: periodicidade das topologias obtidas para (a-d)  $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$  e para (e-h)  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ .

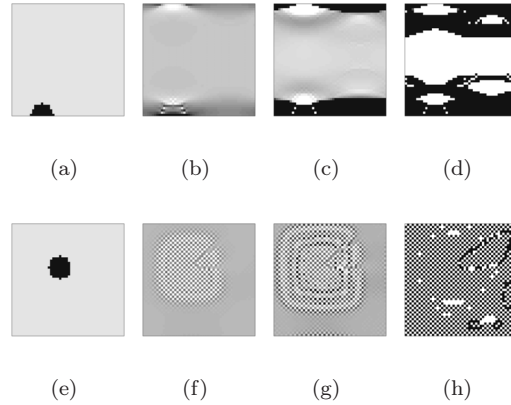


Figura 9.107: Evolução e instabilidades de problemas não-filtrados de homogeneização inversa com soluções iniciais aleatórias alternativas.

A utilização do parâmetro  $d_m$  em aplicações microestruturais tem um significado e comportamento semelhantes ao caso macroestrutural. Por um lado, como se pode observar na figura 9.108, este parâmetro tende a influenciar apenas ligeiramente a topologia obtida quando não se utiliza filtro, praticamente não originando alterações com filtro. Note-se que o facto de se considerar a fase flexível não como vazio, mas como um constituinte de menor rigidez, traz o comportamento destes materiais do campo dos materiais celulares para os materiais compósitos. O facto de haver uma combinação de propriedades a responder às solicitações impostas, em vez de uma combinação de material e vazio, tende a manter a natureza geral da topologia obtida, mas a gerar geometrias ligeiramente diferentes, traduzindo as mudanças mais graduais de propriedades. Este equilíbrio de propriedades é patente nas propriedades constitutivas homogeneizadas obtidas. Observa-se nos exemplos apresentados uma tendência nas diversas propriedades para aumentarem com o aumento de  $d_m$ , como esperado face à crescente relevância da fase flexível. Para valores inferiores a 0,01, verifica-se que as diferenças são inferiores a 2,5%, mas um valor  $d_m = 0,1$  representa já uma diferença de módulo de elasticidade de 31% e de coeficiente de Poisson de 68%. Refira-se que a influência deste parâmetro se verifica de forma equivalente na sua aplicação a problemas térmicos. Por outro lado, inesperada foi a sua influência nos tempos de processamento. Enquanto se esperava que a sua utilização reduzisse o tempo de resolução dos sistemas de equações, verifica-se que estes se mantêm sensivelmente equivalentes à utilização da combinação de material e vazio. Isto pode explicar-se pelo peso e pela quantidade das condições de fronteira de periodicidade, cujo efeito se sobrepõe à relação de magnitude original dos coeficientes da matriz de rigidez.

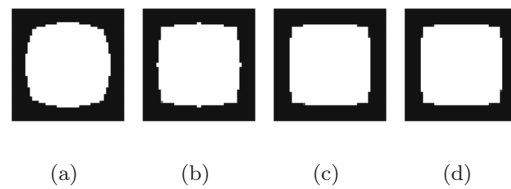


Figura 9.108: Influência do parâmetro de relação entre materiais constituintes na topologia obtida para a imposição de  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ : (a)  $d_m = 0,1$ , (b)  $d_m = 0,01$ , (c)  $d_m = 0,001$  e (d)  $d_m = 0,0001$ .

Um parâmetro que influencia naturalmente os tempos de resolução dos problemas é a tolerância

do método do gradiente conjugado. A utilização de uma penalidade de  $w = 10^4$  pressupõe a utilização adequada de uma tolerância de convergência de  $10^{-8}$ . No entanto, a utilização de tolerâncias mais reduzidas permite a obtenção de bons resultados e tempos de processamento inferiores. Em termos de tempos de processamento, verifica-se que a utilização de tolerâncias de  $10^{-6}$ ,  $10^{-4}$  e  $10^{-2}$  leva a reduções de 22%, 48% e 58%, respectivamente. Em termos de solução óptima, constata-se que mesmo uma tolerância de  $10^{-2}$  (em alguns casos mesmo  $10^{-1}$ ) dá origem a topologias equivalentes. Os maiores erros tendem a concentrar-se nas componentes das matrizes constitutivas que se esperam mais reduzidas em módulo. Observa-se ainda que quanto mais anisotrópico for o material obtido maiores serão os erros observados. Para as tolerâncias mais altas as propriedades obtidas começam a apresentar erros de avaliação, patentes também na qualidade dos correctores obtidos. Enquanto que em problemas de optimização inversa os resultados podem ser satisfatórios, em problemas multiescala é forçoso utilizar tolerâncias baixas o suficiente. Nesses casos, a propagação de erro torna-se demasiado importante e desvia efectivamente os resultados, já que influenciam directamente os resultados macroestruturais e das outras células da estrutura.

Refira-se ainda a utilidade da utilização de elementos quadráticos nestas aplicações. A utilização de elementos de grau superior na HEA permitem uma correcta avaliação de propriedades constitutivas com um número mais reduzido de elementos finitos [Oliveira *et al.* 2009a]. No entanto, a obtenção de soluções definidas depende da resolução da malha de elementos finitos utilizada. A utilização de elementos quadráticos nesta aplicação mantém a vantagem apresentada anteriormente de uma menor tendência para formar padrões *checkerboard*. Contudo, a homogeneização inversa apresenta-se como menos propensa que a optimização topológica macroestrutural, apesar de não imune, a sofrer destes fenómenos. Para além disso, factor efectivamente limitador a este nível, a utilização de elementos quadráticos nos problemas locais acerreta um custo computacional assinalável, tornando-os proibitivos a este nível. A resolução de um problema de homogeneização inversa sem filtro com uma malha de  $20 \times 20$  elementos quadriláteros quadráticos de 8 e 9 nós, para o mesmo número de iterações, demora aproximadamente 6 e 7 vezes mais que o mesmo problema resolvido com elementos lineares, respectivamente.

Os procedimentos aqui desenvolvidos e implementados permitem também o processamento de células representativas unitárias com diferentes configurações. Refira-se a este respeito que o tipo de programação adoptado permite que a grande maioria dos algoritmos sejam flexíveis o suficiente para processar problemas, malhas e condições diferentes sem qualquer alteração. Mostram-se exemplos de problemas resolvidos com CRU hexagonais, onde são utilizadas malhas de 1800 elementos quadriláteros lineares, com 20 elementos em cada aresta na malha hexagonal. As topologias obtidas na resolução dos problemas apresentados anteriormente, utilizando CRU hexagonais, apresentam-se na figura 9.109. Mostra-se aqui a malha utilizada, assim como resultados sem e com recurso a técnicas de filtragem de sensibilidades. Sem entrar em detalhes, verifica-se, por um lado, que a utilização de CRU hexagonais tende a apresentar sinais mais evidentes de dependência de malha. Note-se, no entanto, que esta questão poderá ser devida à condicionantes de percepção e não a desvios numéricos, visto ser habitual o observador esperar configurações *raster* coerentes com uma grelha ortogonal. Constata-se ainda que, em alguns casos, tende a haver uma maior dificuldade na garantia de periodicidade nas faces não-horizontais da CRU. Isto pode constatar-se, por exemplo, nas figuras 9.109(c) e 9.109(h). No caso não-filtrado, surgem detalhes junto aos vértices responsáveis pela garantia de periodicidade. No caso filtrado, esses detalhes são ocasionalmente anulados pela actuação do filtro. Adicionalmente, a figura 9.109(f) mostra um gráfico de anisotropia para o problema hidrostático discutido anteriormente, correspondente à topologia da figura 9.109(i). Como resposta natural ao problema, assim como pela configuração da célula representativa unitária, observa-se que os resultados obtidos a este nível correspondem a uma resposta isotrópica. Esta tendência verifica-se para todos os ensaios executados a este nível, com diferentes níveis de refinamento de malha, diferentes tipos de elemento finito e diferentes parâmetros de execução. Este comportamento está de acordo com a análise feita anteriormente, de tendência natural para uma resposta isotrópica para uma solicitação do tipo  $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ .

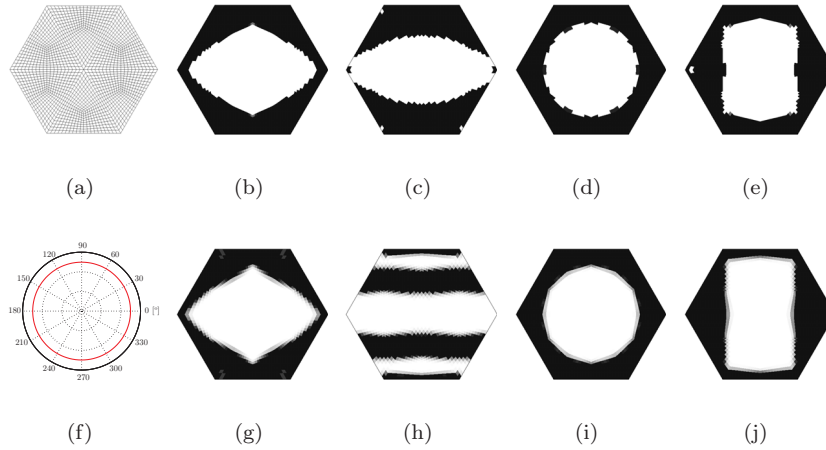


Figura 9.109: Exemplos de homogeneização inversa utilizando uma CRU hexagonal: (a) malha utilizada; topologias resultantes de (a, g)  $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ , (c, h)  $\bar{\epsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ , (d, i)  $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$  e (e, j)  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ , sem e com filtragem de sensibilidades, e (f) mapa de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para os casos de  $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ .

Apresentam-se de seguida aplicações em termoelasticidade. Observa-se que o comportamento da optimização microestrutural é idêntico ao da optimização macroestrutural, revestindo-se das mesmas instabilidades associadas à falta de monotonia do problema. Assim, usa-se como exemplos os problemas  $\bar{\epsilon} = \{1; 0; 0\}^T$  e  $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ , permitindo conciliar o comportamento termoelástico em tracção e em compressão. Utiliza-se mais uma vez a malha  $50 \times 50$  para ilustração. Neste caso passa a ser importante a correcta definição das magnitudes relativas das grandezas envolvidas. Assim, para permitir uma correcta comparação de efeitos mecânico e termomecânico, utilizando uma propriedade base  $\alpha_0 = 1 \times 10^{-5} \text{K}^{-1}$ , as deformações impostas foram da ordem de  $1 \times 10^{-5}$ . Ilustram-se na figura 9.110 os resultados obtidos para estes problemas, sem a utilização de filtros de sensibilidades e impondo variações de temperatura macroestrutural de  $\Delta T = 0,01 \text{ K}$ ,  $\Delta T = 0,1 \text{ K}$  e  $\Delta T = 1 \text{ K}$ . As instabilidades surgem, com esperado, para variações de temperatura que levem a dilatações que se aproximem das deformações mecânicas. É nestes casos que as sensibilidades oscilam de forma mais evidente, tornando os problemas não-monótonos e criando dificuldades de convergência. No caso de tracção uniaxial este problema leva a que apenas se obtenha uma solução definida para uma variação de temperatura reduzida. No caso biaxial, as instabilidades concentram-se na direcção de tracção, já que em compressão a componente de deformação mecânica contraria a dilatação térmica e estabiliza o processo. Este fenómeno verifica-se também nas soluções deste problema usando um filtro de sensibilidades, apresentadas na figura 9.111. Constata-se que o filtro acaba por anular as regiões de instabilidade, convergindo neste caso para soluções que aproximam a resposta apenas à componente de compressão.

Por fim, apresentam-se exemplos de problemas térmicos. Na figura 9.112 mostram-se topologias obtidas com gradientes térmicos macroestruturais orientados segundo diferentes direcções. Na esquerda mostram-se as topologias obtidas sem qualquer controlo de instabilidade e na direita problemas equivalentes utilizando um filtro de sensibilidades. Por um lado, constata-se que as distribuições de material obtidas sem filtro são mais elaboradas. Isto deve-se novamente ao facto de a penalização elevada do SIMP tender a forçar rapidamente os extremos de densidade, convergindo rapidamente para avaliações iniciais de topologia. Em contrapartida, as versões filtradas tendem a passar por estas soluções (*vd.* Fig. 9.113), mas depois evoluir gradualmente para soluções mais simples. Estas soluções correspondem a distribuições de material alinhadas longitudinalmente segundo a direcção do fluxo imposto. No entanto, na realidade, acabam por tender para um número

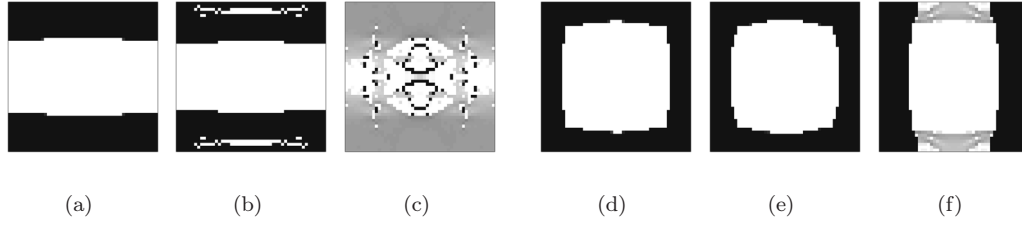


Figura 9.110: Problema de homogeneiza  o inversa em termoelasticidade, sem filtragem de sensibilidades, com (a-c)  $\bar{\varepsilon} = \{1; 0; 0\}^T$  e (d, f)  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ .  $\Delta T$    constante e igual a (a) 0,01 K, (b) 0,1 K e (c) 1 K.

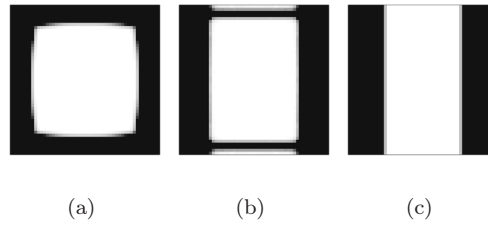


Figura 9.111: Problema de homogeneiza  o inversa em termoelasticidade, com filtragem de sensibilidades:  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$  com  $\Delta T$  constante e igual a (a) 0,01 K, (b) 0,1 K e (c) 1 K.

discreto de solu  es. Este efeito   not rio em  ngulos pr ximos da horizontal ou da vertical, onde o filtro de sensibilidades tende a for ar a converg ncia para esses limites.

#### 9.4.1.4 Exemplos 3-D

Comparando as topologias obtidas com a bibliografia [Coelho 2009], apresentam-se alguns exemplos de topologias resultantes da homogeneiza  o inversa com problemas mec nicos 3-D. Utilizou-se para o efeito uma malha de  $30 \times 30 \times 30$  elementos hexa dricos lineares. Nas figuras 9.114 e 9.115, sem e com filtro de sensibilidades, respectivamente, ilustram-se as solu  es obtidas para a imposi  o dos seguintes campos macroestruturais de deforma  o: 9.114(a,b) e 9.115(a) -  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ ; 9.114(c,d) e 9.115(b) -  $\bar{\varepsilon} = \{0; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ ; 9.114(e,f) e 9.115(c) -  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1; 0; 0; 0\}^T$ ; 9.114(g,h) e 9.115(d) -  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 1; 1\}^T$ ; 9.114(i,j) e 9.115(e) -  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 0; 1\}^T$ ; 9.114(k,l) e 9.115(f) -  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 0; 1; 1\}^T$ ; 9.114(m,n) e 9.115(g) -  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$ ; 9.114(o,p) e 9.115(h) - soma de (d) e (g) -  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 1; 1; 1\}^T$ ; 9.114(q,r) e 9.115(i) - multicarregamento com (d) e (g) -  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T + \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$ ; 9.114(s,t) e 9.115(j) -  $\bar{\varepsilon} = \{2; 1; 5; 1,5; 9; 4\}^T$ . Note-se que na figura 9.115(k) apresenta-se a fase complementar, permitindo uma melhor percep  o da microestrutura obtida.

Constata-se mais uma vez que a homogeneiza  o inversa   menos propensa que a optimiza  o topol gica macroestrutural a sofrer de instabilidades de *checkerboard*. O  nico exemplo deste fen meno nestes casos 3-D surge na vers o n o-filtrada do segundo exemplo (*vd.* Figs. 9.114(c,d)). No entanto,   semelhan a dos casos 2-D anteriores, mant m-se a tend ncia para estabilizar prematuramente devido   penaliza  o de densidades interm dias. Ainda assim, as solu  es s o admiss veis sem filtragem. Com filtro, as solu  es tendem a ser mais simples, convergindo na maior parte dos casos para laminados e/ou modelos de fibras unidireccionais. Apresentam-se na figura 9.116 ilustra  es de periodicidade e mapas de anisotropia para os exemplos  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 1; 1\}^T$ , caso multicarregamento  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$  mais  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$ , e  $\bar{\varepsilon} = \{2; 1; 5; 1,5; 9; 4\}^T$ .

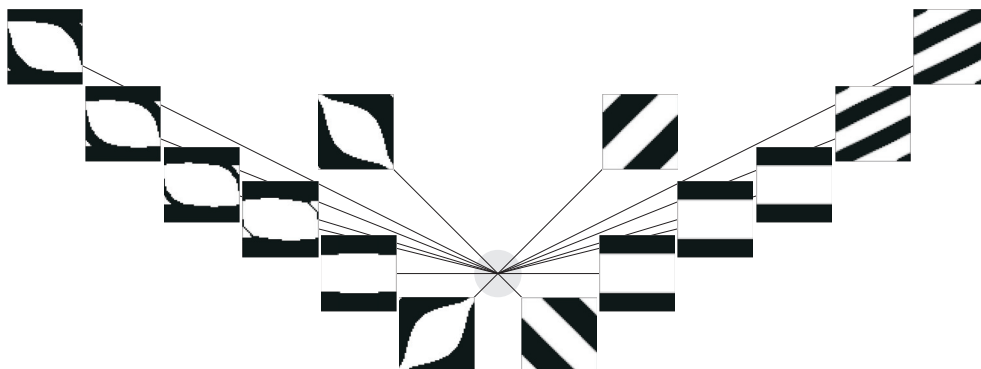


Figura 9.112: Topologias obtidas para um problema térmico de homogeneização inversa, soluções com e sem filtragem de sensibilidades, de acordo com a orientação do fluxo de calor imposto.

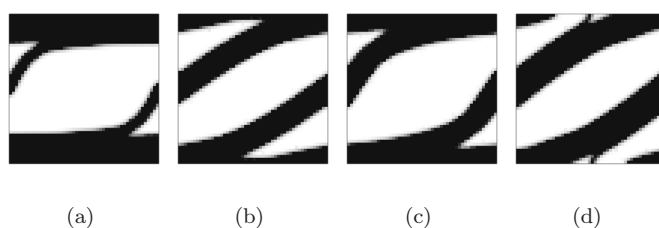


Figura 9.113: Topologias intermédias na evolução iterativa de um problema térmico de homogeneização inversa, com filtragem de sensibilidades, para um caso de fluxo imposto (a, b)  $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 4\}^T$  e (c, d)  $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 5\}^T$ .



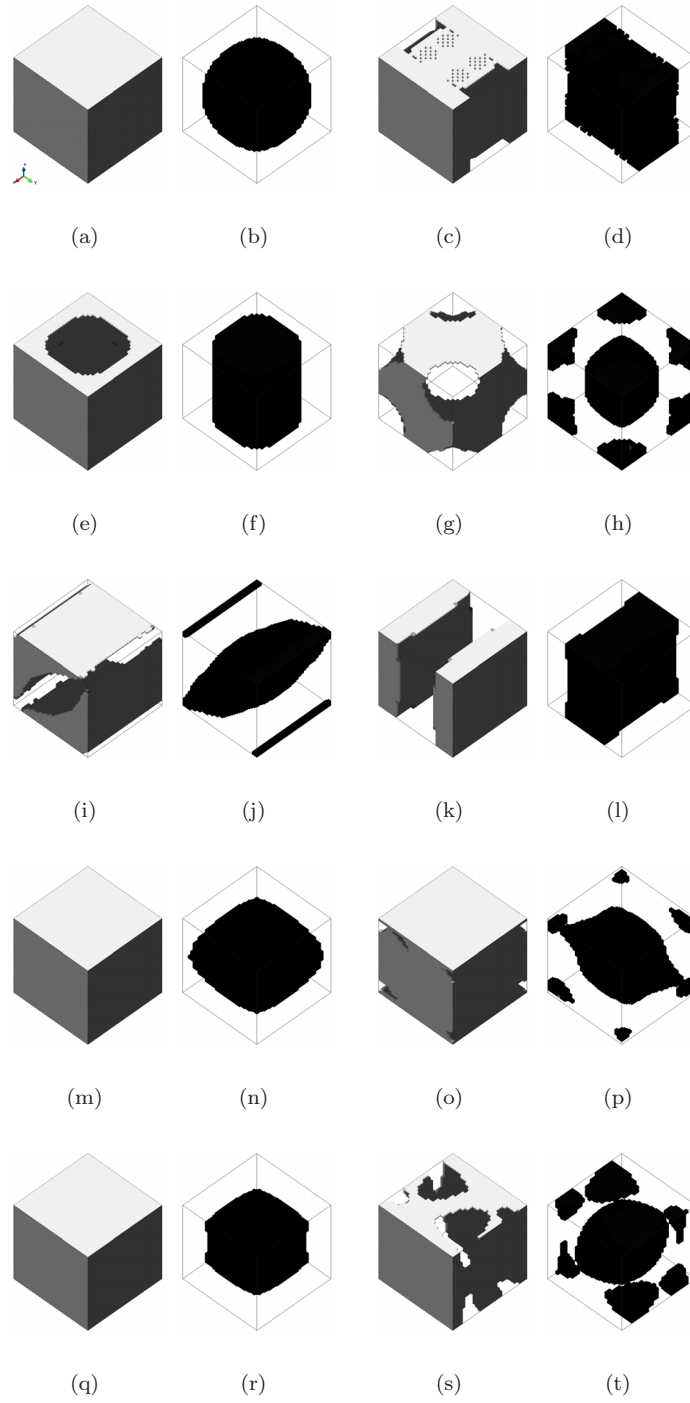


Figura 9.114: Exemplos 3-D de homogeneiza o inversa sem filtro de sensibilidades – fase r gida e fase flex vel: (a,b)  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (c,d)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (e,f)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (g,h)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 1; 1\}^T$ , (i,j)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 0; 1\}^T$ , (k,l)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 0; 0; 1\}^T$ , (m,n)  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$ , (o,p)  $d+g - \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 1; 1; 1\}^T$ , (q,r) multicarregamento  $d+g - \bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T + \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$  e (s,t)  $\bar{\varepsilon} = \{2; 1; 5; 1,5; 9; 4\}^T$ .

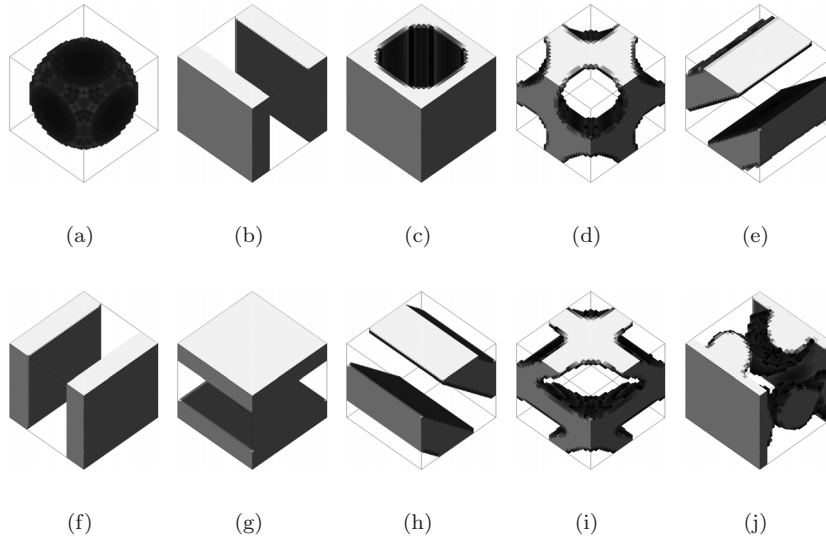


Figura 9.115: Exemplos 3-D de homogeneiza o inversa com filtro de sensibilidades: (a)  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (b)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 1; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (c)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1; 0; 0; 0\}^T$ , (d)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 1; 1\}^T$ , (e)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 0; 1\}^T$ , (f)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 0; 0; 1\}^T$ , (g)  $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$ , (h)  $d+g - \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 1; 1; 1\}^T$ , (i) multicarregamento  $d+g - \bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T + \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$  e (j)  $\bar{\varepsilon} = \{2; 1; 5; 1,5; 9; 4\}^T$ .

No que diz respeito a problemas t rmicos, o comportamento global   extrapol vel do apresentado para o exemplo bidimensional. Ilustra-se na figura 9.118(a) a topologia  ptima resultante de um exemplo de imposi o de gradiente macroestrutural de temperatura  $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 1; 1\}^T$ . A topologia obtida segue uma orienta o correspondente   orienta o do fluxo imposto, tal como esperado. As restantes figuras 9.118 representam os correctores (b-g) mec nicos, (h) termomec nico e (i) t rmicos, assim como os respectivas solicita es caracter sticas. Na figura 9.118, por sua vez, apresenta-se a resposta obtida para o caso  $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 0,5; 0,5\}^T$ . Mais uma vez existe uma tend ncia inicial semelhante aos casos bidimensionais, com posterior simplifica o da solu o para uma topologia mais simples. Nas itera es interm dias apresentadas   percept vel a gradual separa o de fases, iniciada neste caso de forma desalinhada pela influ ncia da orienta o do fluxo macroestrutural.

### 9.4.2 Optimiza o Macroestrutural

Antes de abordar a optimiza o hier rquica, que actua simultaneamente ao n vel da macro- e da microescala, faz-se refer ncia   influ ncia da configura o da microescala na optimiza o macroestrutural. Para o efeito, um dos modos de funcionamento implementados neste trabalho permite a avalia o das propriedades constitutivas de materiais comp sitos e celulares, utilizando a homogeneiza o por expans o assint tica, enquadrada na optimiza o macroestrutural. Assim, retoma-se o exemplo apresentado anteriormente de viga MBB, apresentado aqui com a malha M4, utilizando diferentes configura es de material em vez da defini o isotr pica do SIMP. Note-se que o SIMP continua a ser utilizado. No entanto, em vez de afectar propriedades isoladas de um material isotr pico passa a definir a exist ncia ou n o de um material com uma microestrutura definida. Neste caso, enquanto a macroescala oscila num processo de optimiza o entre vazio e material, o material utilizado   por sua vez definido *a priori* por uma microestrutura. Esta pode ser constitu da por v rios materiais distintos, assim como por combina es de material e vazio, e as

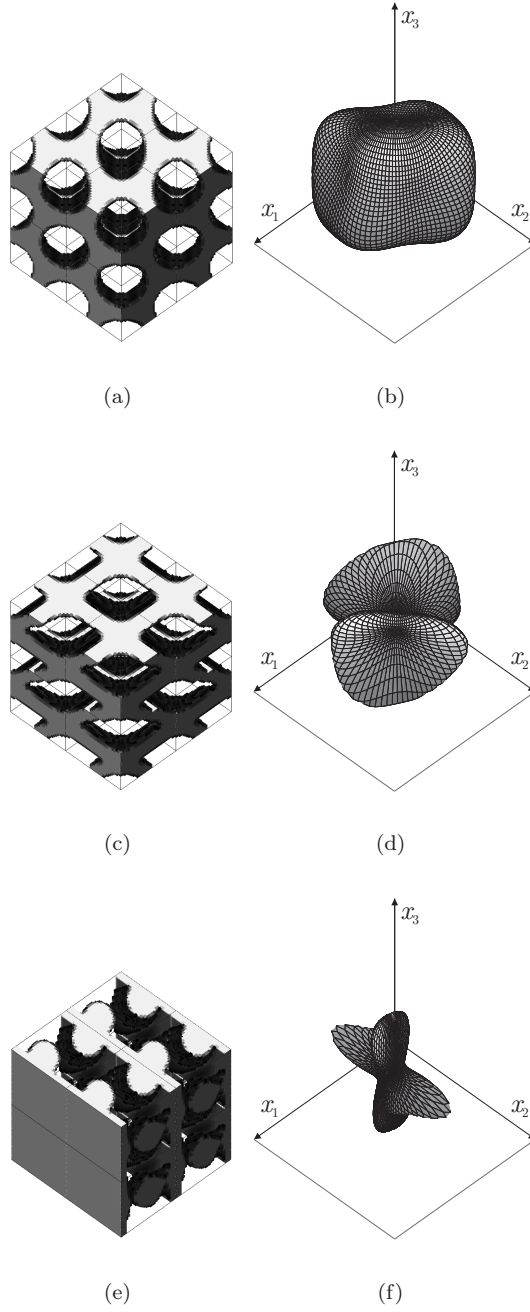


Figura 9.116: Ilustração de periodicidade e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para os exemplos 3-D de homogeneização inversa com filtro de sensibilidades: (a,b)  $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 0; 1; 1; 1\}^T$ , (c,d) ML d+g,  $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 1; 0; 0; 0\}^T + \bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0; 0; 0; 0\}^T$  e (e,f)  $\bar{\varepsilon} = \{2; 1; 5; 1,5; 9; 4\}^T$ .

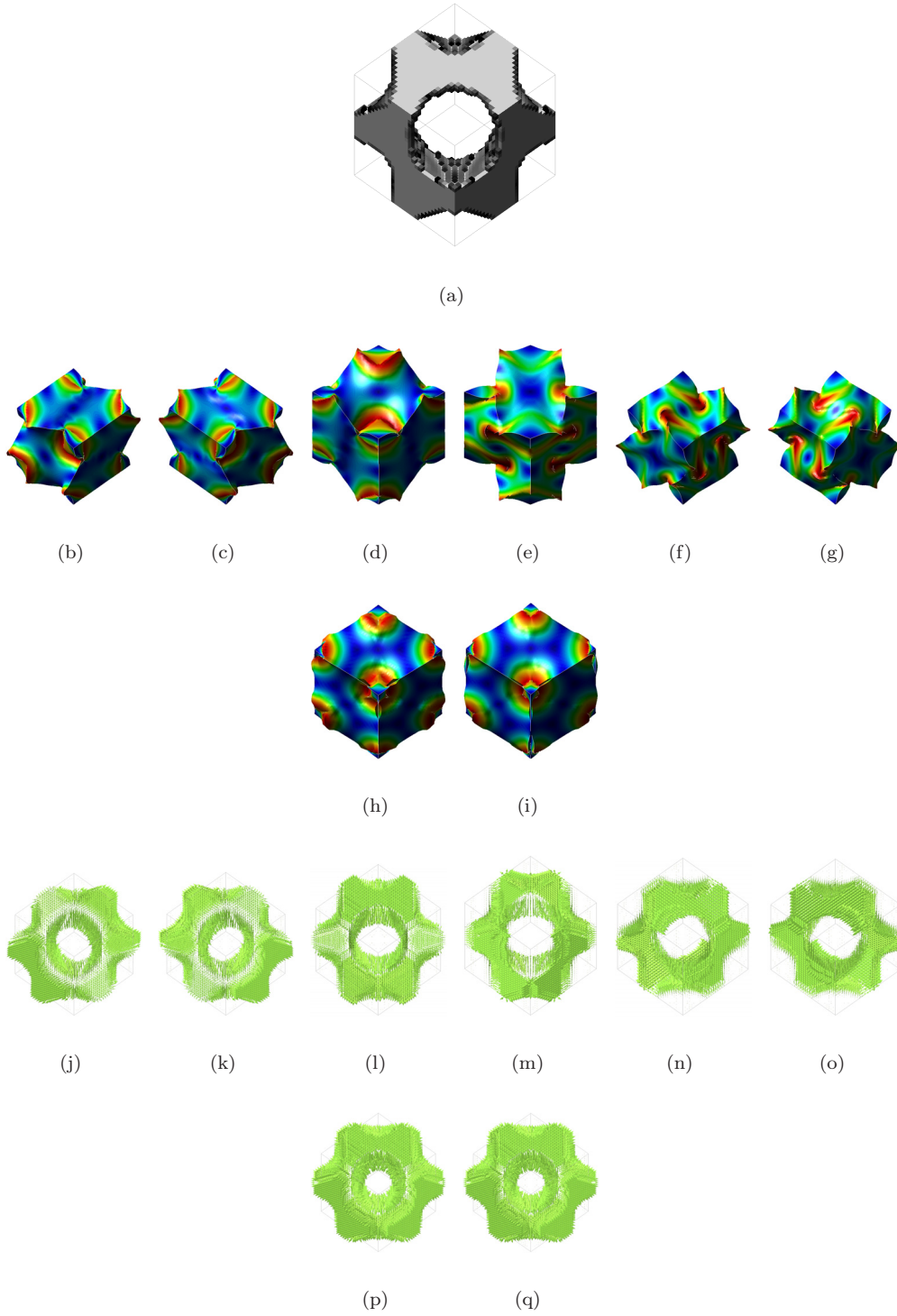


Figura 9.117: Homogeneização por expansão assintótica: (a) topologia obtida como resposta a  $\bar{\varepsilon} = \{0, 0, 0, 1, 1, 1\}^T$ , (b-g) correctores mecânicos, (h) termomecânico e (i) térmico, e (j-q) respectivas solicitações características.

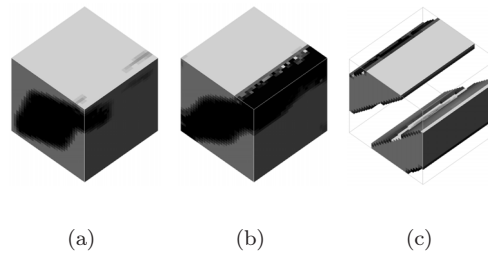


Figura 9.118: Problema de homogeneização inversa térmico com  $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 0,5; 0,5\}^T$  e filtragem de sensibilidades: (a) topologia ótima e (b, c) soluções intermédias.

suas propriedades são avaliadas apenas na primeira iteração do procedimento de homogeneização macroestrutural.

Na figuras 9.119(a), 9.119(f) e 9.119(k) apresentam-se três exemplos de célula representativa unitária, representando duas configurações laminares de direcções ortogonais e uma configuração tetragonal, ou seja, de material ortotrópico com propriedades idênticas em duas direcções ortogonais no plano. Todas estas distribuições de material têm uma fracção volúmica de reforço de  $f_v = 0,5$ . O reforço, representado pela fase escura, tem uma rigidez predefinida. O material da matriz é definido com diferentes níveis de rigidez, sendo esta considerada como 10, 100 ou 1000 vezes inferior à rigidez do material de reforço. Estas alterações dão origem a diferentes respostas constitutivas do material compósito utilizado. A dependência do módulo de elasticidade com a orientação considerada é representada nas figuras 9.119(b), 9.119(g) e 9.119(l). Adicionalmente, representa-se em cada mapa de anisotropia todos os casos de influência da rigidez relativa, sendo o material da matriz tanto mais rígido quanto mais exterior for a curva obtida. As topologias obtidas são apresentadas nas figuras seguintes a cada CRU. Observa-se uma clara influência do material utilizado sobre a topologia macroestrutural ótima. Por um lado, verifica-se que esta influência é notória mesmo com diferenças reduzidas entre as propriedades das fases envolvidas. Por outro lado, quanto maior for esta diferença maior é a discrepância entre topologias óptimas obtidas. Isto deve-se ao acentuar do carácter ortotrópico do comportamento do material. A gradual redução da rigidez da fase flexível leva a que a orientação da fase rígida seja cada vez mais determinante, sendo as macroestruturas óptimas claramente coerentes com as orientações dos elementos resistentes.

Os exemplos apresentados na figura 9.120 mostram uma influência menos marcada. Neste caso, as microestruturas estudadas correspondem a uma inclusão elipsoidal numa matriz contínua de material mais flexível, correspondendo a uma fracção volúmica de reforço  $f_v = 0,185$ . O reforço elipsoidal é colocado segundo quatro orientações alternativas, espaçadas de  $45^\circ$ . Mais uma vez, a rigidez da matriz é considerada como 10, 100 ou 1000 vezes inferior à rigidez do material de reforço. Neste caso, a continuidade da matriz em todo o perímetro da CRU apresenta-se como um factor determinante no comportamento obtido. Esta concentra a maior parte da deformação do material. Não considerando interacções entre partículas de reforço, os resultados constitutivos apresentam-se como efectivamente dependentes da orientação do reforço, mas claramente dominados pela matriz em termos de magnitude. A natureza geral do comportamento do material, apesar das acentuadas diferenças de magnitude, apresenta-se menos sensível à variação de rigidez. Ainda assim, fruto da normalização e do carácter linear do comportamento do material, verifica-se que esta magnitude não tem influência nos resultados. Note-se que as soluções diagonais, pela geometria mais equilibrada da matriz, apresentam comportamentos mais próximos do isotrópico. Por esta razão, as topologias obtidas aproximam-se mais dos exemplos apresentados em secções anteriores e revelam-se menos sensíveis à orientação da partícula de reforço.

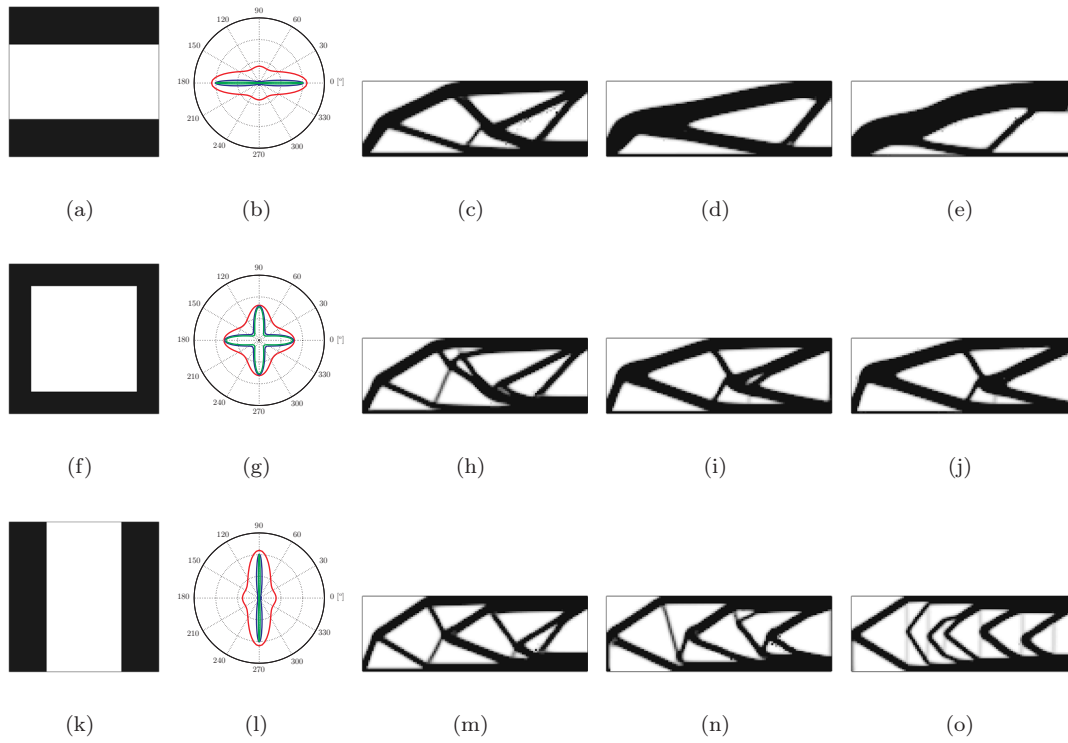


Figura 9.119: Optimização macroestrutural com diferentes topologias microestruturais e diferentes relações de magnitude de materiais constituintes: (a, f, k) microestruturas, (b, g, l) mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) e (c-e, h-j, m-o) topologias macroestruturais óptimas com diferenças crescentes entre materiais constituintes.

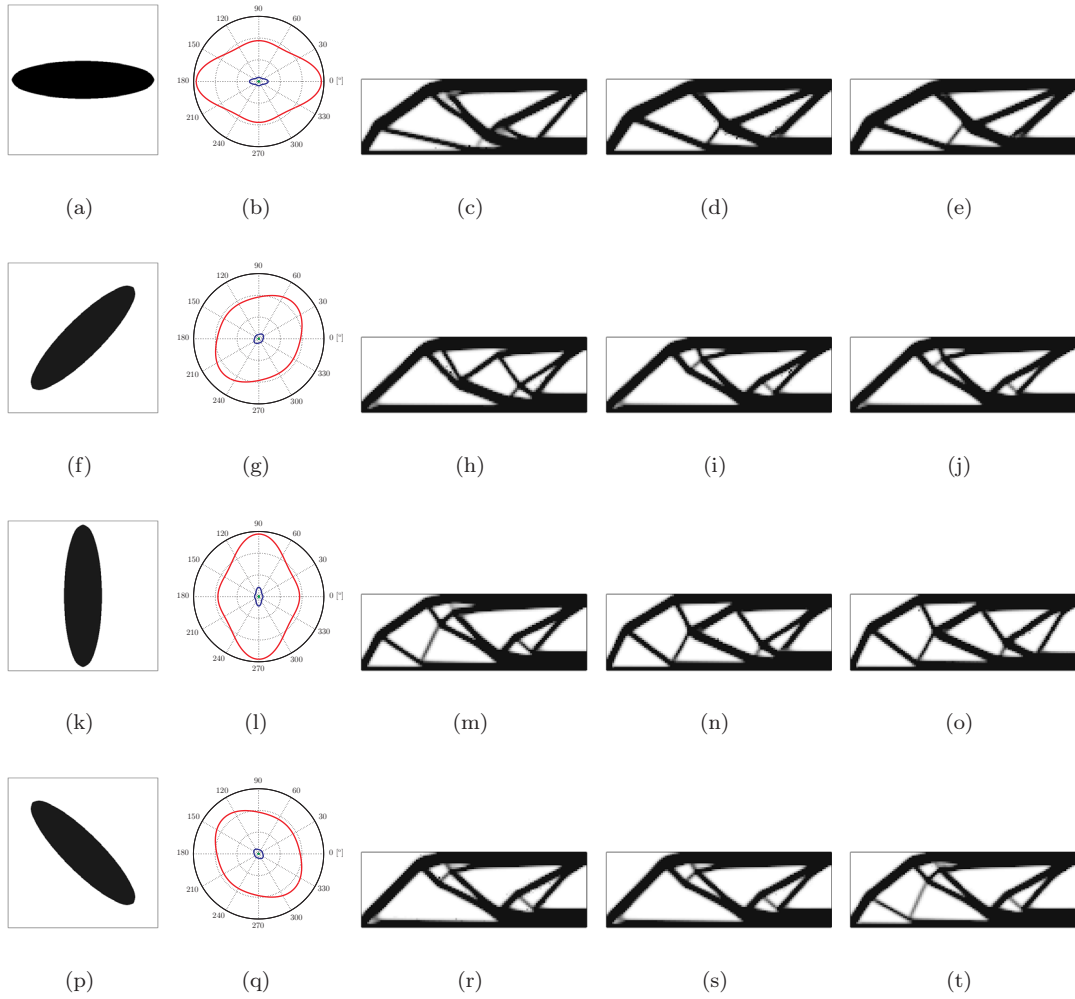


Figura 9.120: Optimização macroestrutural com microestruturas prescritas, de acordo com a orientação de uma inclusão elipsoidal, e diferentes relações de magnitude de materiais constituintes: (a, f, k, p) microestruturas, (b, g, l, q) mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) e (c-e, h-j, m-o, r-t) topologias macroestruturais óptimas com diferenças crescentes entre materiais constituintes.

### 9.4.3 Optimização Hierárquica em Elasticidade

Após os estudos anteriores, é agora possível analisar o comportamento do programa desenvolvido em aplicações de optimização hierárquica. Abordam-se aqui questões gerais de optimização hierárquica em elasticidade, centradas no comportamento das diferentes estratégias implementadas e questões numéricas mais relevantes. Os diversos modos adicionais de funcionamento remetem-se para o Capítulo 11 deste trabalho. Refira-se ainda que esta secção se centra em questões gerais e específicas da abordagem hierárquica. A grande maioria dos parâmetros e das estratégias abordados anteriormente (*e.g.* tolerâncias de resolução de sistemas ou métodos de continuação) têm visível impacto nos resultados aqui ilustrados. No entanto, a variedade e a extensão das análises associados ao seu estudo são desadequados no contexto deste documento. Adicionalmente, muitas das conclusões retiradas anteriormente são extrapoláveis para esta aplicação mais abrangente. Assim, opta-se aqui por fazer uma avaliação geral do funcionamento destas metodologias, comparando estratégias e métodos de optimização em torno de um problema-tipo.

À semelhança de grande parte deste capítulo, resolvem-se nesta secção problemas MBB em diferentes configurações de cálculo. Na figura 9.121 apresentam-se as 3 malhas macroestruturais estruturadas utilizadas nesta secção, designadas por MH1, MH2 e MH3. Estas são constituídas, respectivamente, por  $15 \times 5$ ,  $30 \times 10$  e  $45 \times 15$  elementos finitos quadriláteros lineares. Os problemas aqui apresentados são resolvidos com imposição de uma restrição de volume correspondente a uma fracção volúmica global de  $f_v = 0,5$ . Utiliza-se uma configuração de dois materiais em vez de material e vazio, utilizando-se um valor  $d_m = 0,0001$ . Como referido anteriormente, verifica-se que esta diferença de magnitude entre materiais constituintes aproxima os resultados de material e vazio. No entanto, a utilização deste parâmetro traz outras vantagens. Por um lado, verifica-se que é menos sensível às instabilidades locais, já que por vezes problemas de convergência de um problema local podem comprometer toda a resolução. Por outro lado, permite testar também o funcionamento da configuração de cálculo que diz respeito a considerar materiais compósitos em vez de materiais celulares. Refira-se que se utiliza na generalidade dos problemas uma penalidade  $p = 4$  no SIMP, assim como um filtro de sensibilidades nos problemas locais. Refira-se ainda que se utilizam critérios de paragem voluntariamente apertados. Apesar de na maior parte dos casos apresentados se obterem resultados satisfatórios muito antes, as soluções apresentadas correspondem geralmente à iteração 200. A malha microestrutural estruturada utilizada nos próximos ensaios é constituída por  $20 \times 20$  elementos quadriláteros lineares.

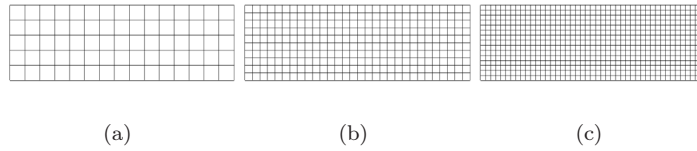


Figura 9.121: Malhas utilizadas nos problemas globais de optimização topológica hierárquica: (a) MH1 –  $15 \times 5$  elementos –, (b) MH2 –  $30 \times 10$  elementos – e (c) MH3 –  $45 \times 15$  elementos.

Os modelos hierárquicos aqui analisados são o H1 e o H3 (*vd.* Sec. 7.5.1), correspondentes a estratégias tipo I e tipo II [Coelho *et al.* 2008a], respectivamente. No modelo H1, as variáveis do problema são exclusivamente as densidades microestruturais,  $\mu$ . Neste caso, as densidades macroestruturais,  $\rho$ , são variáveis dependentes e definem o volume local de cada CRU, assim como, consequentemente, a densidade de cada elemento macroestrutural. Segundo esta abordagem, começa-se por avaliar a utilização do método das assíptotas móveis e configurações adaptadas a partir deste. Refira-se que a combinação do MMA com uma estrutura do tipo H1, neste trabalho, corresponde a resolver um único problema onde todas as variáveis microestruturais são actualizadas em simultâneo. Na figura 9.122 apresentam-se as topologias macroestruturais obtidas para cada uma



das malhas apresentadas. Estas foram obtidas utilizando o MMA padrão, MMA com controlo de actualização de modo a tornar as variações mais lentas com  $s_0 = 0,9$  e  $s_0 = 0,95$ , e com controlo activo desta variável, utilizando  $s_0 = 0,0$ . Mostram-se ainda os resultados obtidos com o método CONLIN. Formalmente, estas topologias apresentam regiões evidentes de densidades intermédias. Ao contrário dos casos macroestruturais avaliados anteriormente, o que se obtém aqui não é uma estrutura aproximadamente discreta, mas uma distribuição local de materiais constituintes. A representação topológica macroestrutural corresponde apenas à tradução macroscópica das fracções volumicas dos materiais constituintes. Assim, é aqui válida a existência de densidades intermédias. Em termos de comparação entre métodos, as maiores diferenças surgem para malhas macroestruturais mais refinadas. Note-se que o problema MH1 tem  $5 \times 15$  elementos macroestruturais, cada um com  $20 \times 20$  elementos microestruturais associados, correspondendo a 30000 variáveis de optimização. O problema MH3, por sua vez, corresponde já a 270000 variáveis. Ainda assim, apesar de algumas diferenças em termos de densidades intermédias macroestruturais, verifica-se que a natureza das topologias obtidas é coerente entre métodos. Observa-se ainda que existe uma correlação entre a agressividade do método utilizado e as soluções obtidas. Entre o MMA e o MMA com controlo activo, como a actualização das variáveis só é afectada a partir de determinado ponto, os resultados são essencialmente idênticos. No entanto, nos outros métodos observa-se uma quantidade de elementos macroestruturais com densidades intermédias crescente com a suavidade de actualização do método utilizado. Existe também uma tendência para o surgimento de alguns padrões *checkerboard*. No entanto, este fenómeno tem aqui características ligeiramente diferentes. Neste caso, surgem usualmente em torno de regiões de densidade intermédia e correspondem a pequenas oscilações de topologia local.

Na figura 9.123 mostra-se a evolução da função-objectivo para o problema resolvido com o MMA. Note-se que, de acordo com a equação 7.64, o objectivo é minimizar a função energia de deformação. Apresentam-se apenas as curvas referentes a este método porque, em termos gráficos, são praticamente coincidentes com as obtidas para as diferentes versões de MMA, CONLIN ou mesmo OC. No entanto, apresentam no geral alguns detalhes de comportamento diferentes. Comparando a restrição de volume ao longo do processo iterativo, apresentada na figura 9.124 para os métodos MMA e CONLIN, pode verificar-se que o seu comportamento apresenta algumas diferenças em termos de estabilidade. Constata-se, no entanto, que mesmo nesta aplicação o seu comportamento é coerente com o verificado anteriormente. Atente-se ainda no facto de a função objectivo corresponder à integração de cada uma das funções-objectivo locais. Estas apresentam tendências semelhantes, apesar de directamente ligadas ao respectivo volume. Na figura 9.125 apresentam-se exemplos destas parcelas locais para alguns elementos.

Em termos globais, um ponto importante na evolução das funções-objectivo ilustradas na figura 9.123 é o facto de todas tenderem e convergirem para valores bastante aproximados, ao contrário de resultados apresentados anteriormente com diferentes níveis de refinamento de malha em problemas exclusivamente macroestruturais. Isto deve-se à forma como este problema é relaxado com a inclusão de problemas locais. Mesmo com malhas pouco refinadas na microescala, estes problemas tendem a dar respostas globais com reduções aproximadas nas funções-objectivo. Isto deve-se ao facto de cada problema local acrescentar um nível de detalhe local que de certa forma equilibra a falta de detalhe macroestrutural. Neste caso, em vez de o detalhe ser fornecido em termos geométricos é fornecido em termos constitutivos, levando a que uma malha pouco refinada permita uma resposta a um dado objectivo aproximada àquela de uma malha mais refinada. Assim, a distribuição de propriedades ao longo da estrutura depende directamente da topologia local e varia em termos de anisotropia. Isto pode ilustrar-se na figura 9.126, para o caso da topologia MH1 obtida com MMA. Pode ver-se aqui a distribuição do módulo de elasticidade associado à direcção horizontal do material para cada elemento finito macroestrutural. Por sua vez, utilizando uma escala logarítmica, ilustra-se nas figuras 9.127 a distribuição de módulos de elasticidade segundo a direcção horizontal e vertical, respectivamente. Estas propriedades não são coincidentes, como seria o caso numa resolução macroestrutural com propriedades apenas afectadas pela densidade macroestrutural. O efeito destas diferenças é visível comparando os resultados obtidos com os

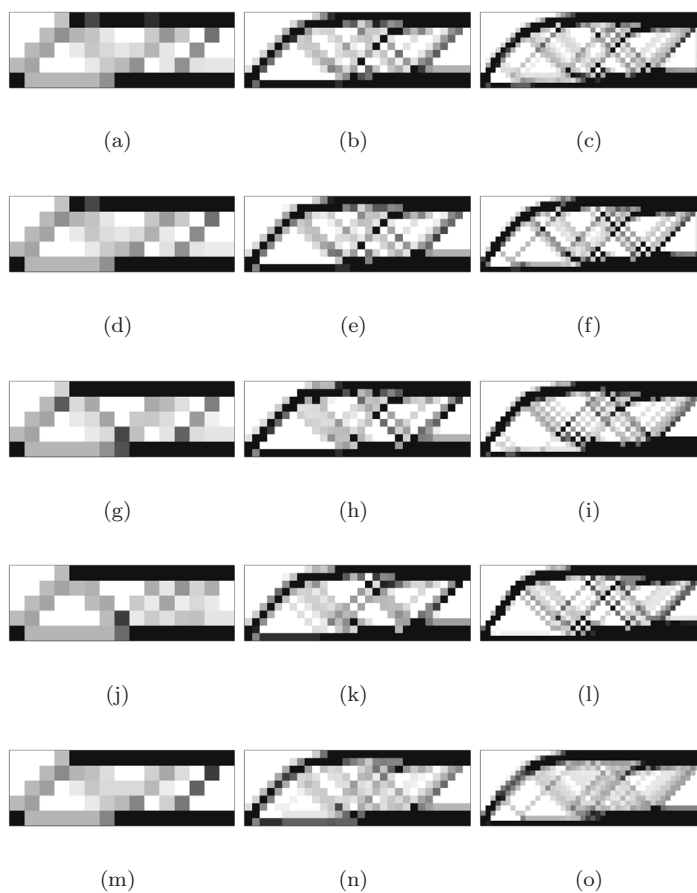


Figura 9.122: Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de MMA com (a-c)  $s_0 = 0,1$ , (d-f)  $s_0$  variável, (g-i)  $s_0 = 0,9$  e (j-l)  $s_0 = 0,95$ , assim como (m-o) CONLIN.

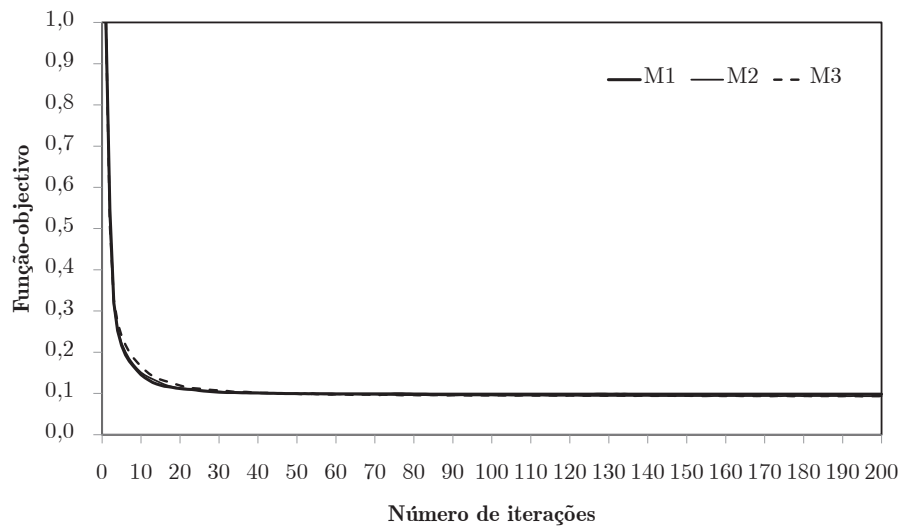


Figura 9.123: Evolução da função-objetivo para um problema de otimização topológica hierárquica, com discretizações MH1 a MH3, utilizando o modo H1 e o método MMA.

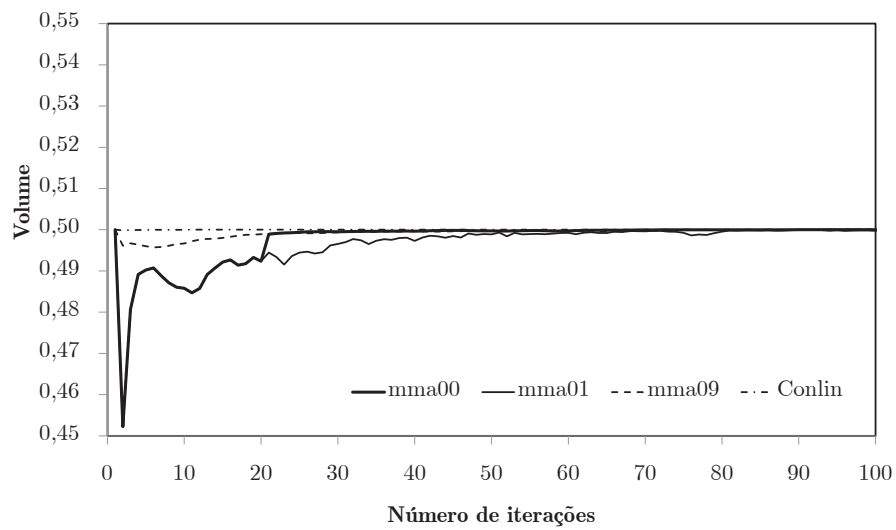


Figura 9.124: Evolução da restrição global de volume para um problema de otimização topológica hierárquica, com discretizações MH1 a MH3, utilizando o modo H1 e diferentes configurações do método MMA e CONLIN.

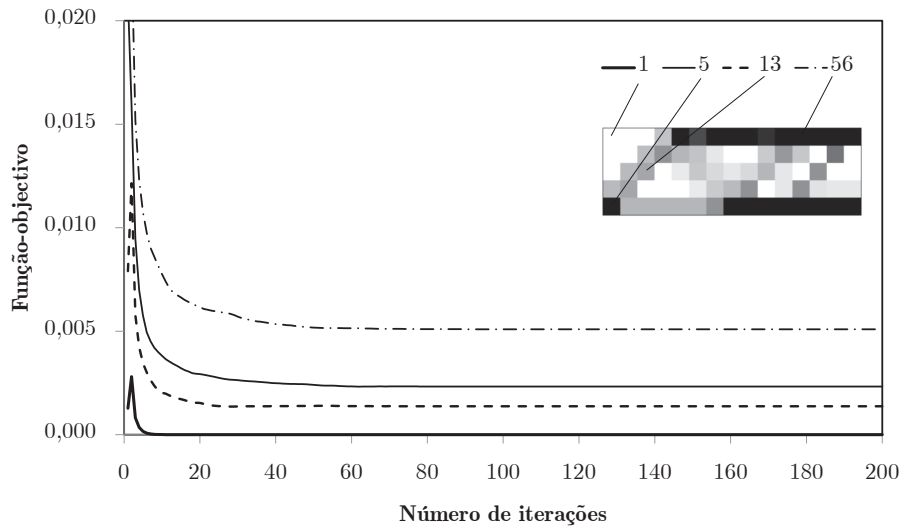


Figura 9.125: Evolução das parcelas locais (elementos 1, 5, 13 e 56) da função-objetivo para um problema de optimização topológica hierárquica, problema MH1, utilizando o modo H1 e o método MMA.

correspondentes à resolução dos mesmos problemas sem considerar os problemas locais. Assim, a resolução estritamente macroestrutural dos problemas apresentados, com filtros de sensibilidade, conduz às topologias apresentadas na figura 9.128. Para comparar os dois tipos de resolução, apresenta-se na figura 9.129 a evolução das funções-objetivo para cada um dos três problemas, resolvidos segundo a metodologia hierárquica e segundo uma metodologia de optimização macroestrutural (em cor cinza). Utiliza-se aqui, para ambos os problemas, a função-objetivo calculada de acordo com a abordagem macroestrutural. Esta corresponde ao trabalho das forças externas da estrutura global e é calculada recorrendo à equação 5.6. Constata-se que os resultados obtidos através da metodologia hierárquica correspondem, mesmo para o problema menos refinado, a resultados sempre melhores que os obtidos para o caso macroestrutural. Esta afirmação é ainda comprovada pelos deslocamentos verticais máximos calculados para cada um dos problemas. Estes são resumidos na tabela 9.9, normalizados em relação ao melhor resultado da resolução macroestrutural.

Tabela 9.9: Deslocamentos verticais normalizados, utilizando estratégias hierárquicas e uma resolução macroestrutural.

Malha	Hierárquica	Macroestrutural
MH1	0,88	2,94
MH2	0,87	1,17
MH3	0,88	1,00

A estratégia de resolução H1 é também aplicada segundo um método de critério de óptimo [Rodrigues *et al.* 2002]. Neste caso, a aplicação deste método corresponde exactamente à metodologia de lagrangiano aumentado utilizada para definir as condições gerais do problema (*vd.* Sec. 6.4) e segue o esquema de actualização de ponto fixo apresentado na Secção 7.5.2. Ao contrário da configuração anterior, apesar das únicas variáveis independentes continuarem a ser as densidades microestruturais, cada problema local pode neste caso ser resolvido separadamente. Na figura 9.130 ilustram-se as topologias obtidas com a utilização do método de critério de óptimo, utilizando

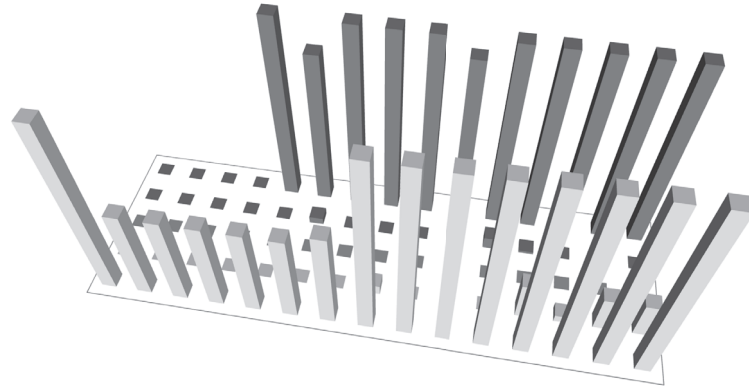
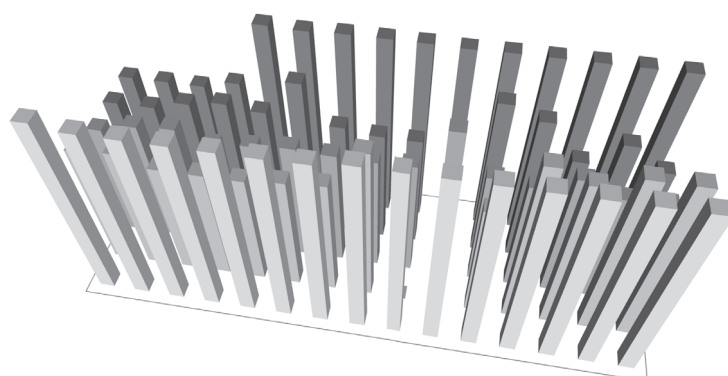


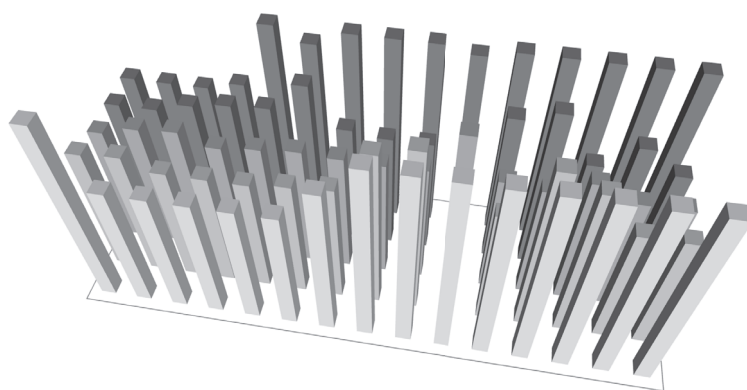
Figura 9.126: Ilustração da distribuição do módulo de elasticidade  $E_{11}$  para a topologia MH1 obtida na resolução de um problema de optimização topológica utilizando o modo H1 e o método MMA.

diferentes valores no limite móvel,  $\zeta$ , que controla a actualização das variáveis de densidade microestrutural. Utilizam-se valores de  $\zeta = 0,1$ ,  $\zeta = 0,2$  e  $\zeta = 0,5$ . Observa-se uma clara influência deste parâmetro. Um limite móvel mais relaxado leva a que as variáveis locais tenham tendência a encostar aos extremos. Como inicialmente é a deformação macroestrutural de um dado elemento e não tanto a topologia local correspondente que domina a distribuição de sensibilidades, as variáveis locais rapidamente assumem valores de 0 ou 1 em bloco. É por esta razão que as topologias macroestruturais são quase discretas para  $\zeta = 0,5$ . Este fenómeno é tanto menor quanto mais apertado for  $\zeta$ . Com valores mais pequenos o problema tem tempo para reconfigurar as topologias locais, levando assim ao aparecimento de mais CRU com fracções volúmicas intermédias. Esta questão pode também ser ilustrada com a figura 9.131. Mostram-se aqui as primeiras iterações da evolução da função-objectivo, para o problema MH1, com os diferentes valores de limite móvel. Apesar de convergirem para valores aproximados, a maior agressividade das actualizações com um valor  $\zeta$  superior é notória. Este comportamento está directamente associado ao lagrangiano aumentado e à correspondente influência da restrição de volume global. Por conseguinte, apresenta-se na figura 9.132 a evolução das restrições de volume globais para os três problemas em análise e os diferentes limites móveis. Constata-se que o limite móvel efectivamente torna a resposta à restrição de volume mais agressiva, estabilizando mais cedo que a correspondente aos valores mais baixos. A actualização de variáveis e a resposta à restrição de volume é mais progressiva com limites mais apertados. Verifica-se também que nestes casos existe menos dispersão da evolução da restrição de volume para os diferentes problemas. Isto é também visível ao nível do multiplicador de Lagrange associado à imposição da condição de volume global,  $\Lambda$ , representado na figura 9.133. Observa-se que para os diversos problemas resolvidos com  $\zeta = 0,2$  ou  $\zeta = 0,1$  o multiplicador de Lagrange converge sensivelmente para o mesmo valor. No entanto, com  $\zeta = 0,5$  a dispersão a este nível é muito superior. Isto deve-se ao facto de as variáveis serem actualizadas de forma demasiado agressiva e a solução convergir rapidamente para um óptimo local. Refira-se que, para além de ser mais crítico em termos de normalização, este método necessita de algum esforço de configuração de parâmetros. Para tentar tornar esta aplicação do lagrangiano aumentado menos sensível aos parâmetros do utilizador, utiliza-se neste trabalho um esquema de continuação para o parâmetro de penalidade, aumentando-o gradualmente ao longo do processo iterativo. Utiliza-se um valor inicial  $\Lambda = 1$ , já que a restrição de volume é respeitada na primeira iteração (*vd.* Eq. 7.63).

Ainda numa abordagem H1, apesar de igualmente válido para a metodologia H3, convém referir que a utilização de elementos quadráticos é uma boa resposta para as instabilidades de *checkerboard* apresentadas. Ilustram-se na figura 9.134 topologias macroestruturais obtidas com MMA,



(a)



(b)

Figura 9.127: Ilustração da distribuição dos módulo de elasticidade (a)  $E_{11}$  e (a)  $E_{22}$  para a topologia MH1 obtida na resolução de um problema de otimização topológica utilizando o modo H1 e o método MMA, segundo uma escala logarítmica.



(a)

(b)

(c)

Figura 9.128: Resolução estritamente macroestrutural dos problemas de otimização topológica MH1, MH2 e MH3.

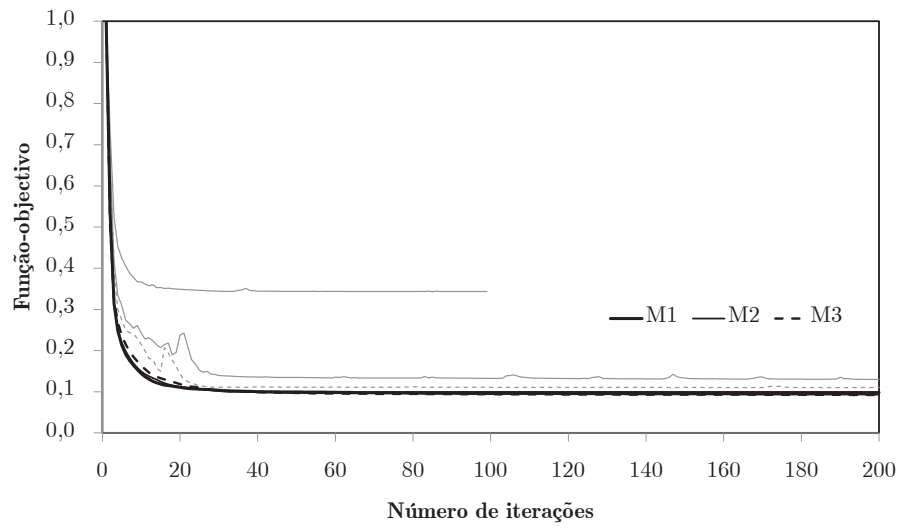


Figura 9.129: Evolução da função-objetivo macroestrutural na resolução hierárquica de um problema de otimização topológica.

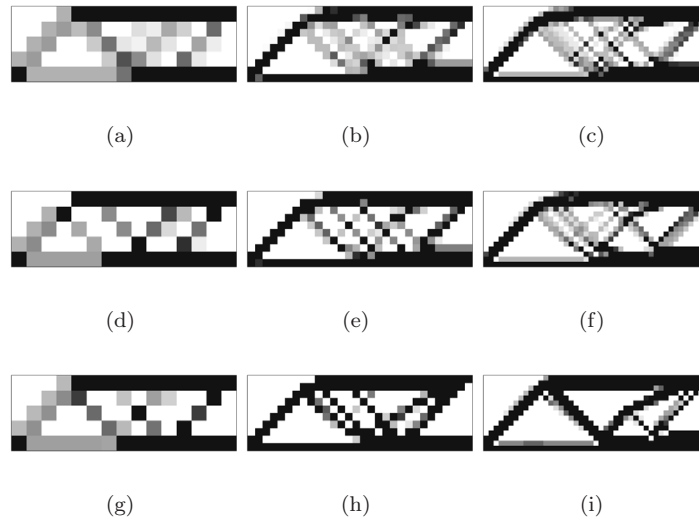


Figura 9.130: Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com (a-c)  $\zeta = 0,1$ , (d-f)  $\zeta = 0,2$  e (g-i)  $\zeta = 0,5$ .

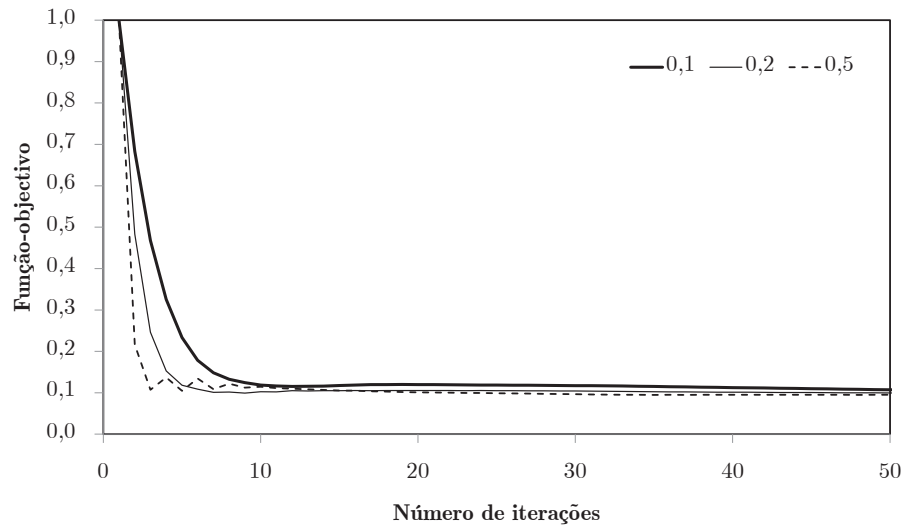


Figura 9.131: Evolução da função-objectivo na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com  $\zeta = 0,1$ ,  $\zeta = 0,2$  e  $\zeta = 0,5$ , para o problema MH1.

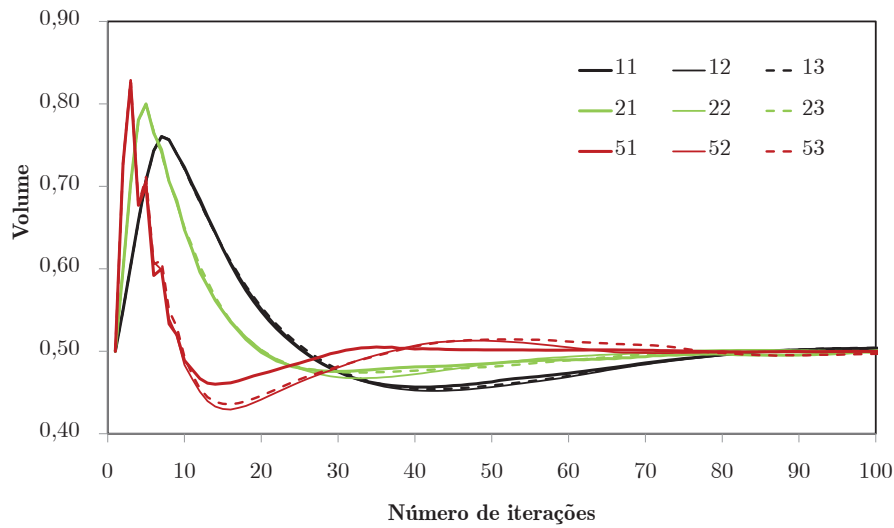


Figura 9.132: Evolução da restrição de volume na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com  $\zeta = 0,1$ ,  $\zeta = 0,2$  e  $\zeta = 0,5$ .



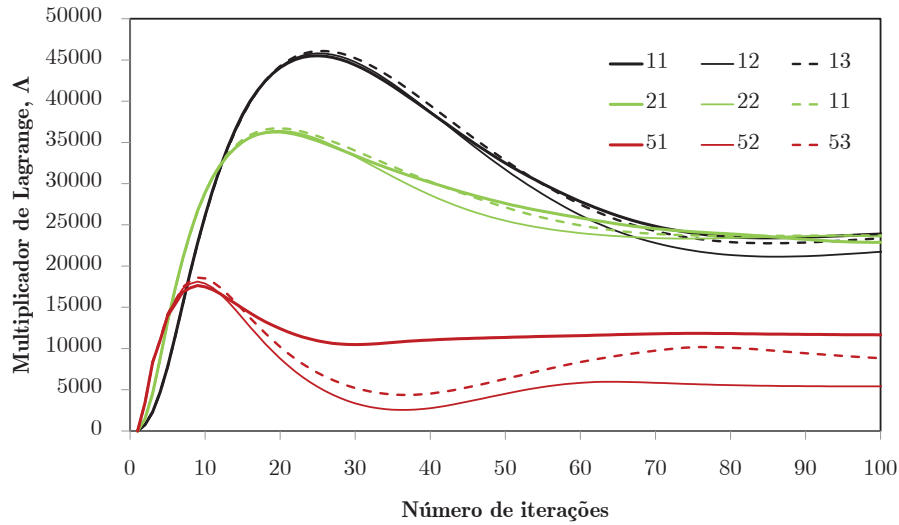


Figura 9.133: Evolução do multiplicador de Lagrange,  $\Lambda$ , na optimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com  $\zeta = 0,1$ ,  $\zeta = 0,2$  e  $\zeta = 0,5$ .

utilizando elementos quadráticos de 8 nós apenas na macroescala. É importante realçar que aqui os valores de função-objectivo no óptimo são muito próximos, mas ligeiramente mais elevados, sendo esta diferença correspondente ao facto de não haver a rigidez artificial induzida pelo fenómeno *checkerboard* em elementos lineares. Note-se ainda que, mesmo com elementos quadráticos, o custo computacional do problema macroestrutural é completamente desprezável face ao total. Em contrapartida, como referido nas secções anteriores, a utilização de elementos quadráticos na microescala exige demasiados recursos sem um verdadeiro retorno em termos de qualidade de resultados.

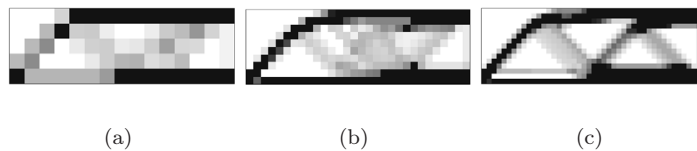


Figura 9.134: Topologias macroestruturais obtidas na optimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA com elementos macroestruturais quadráticos de 8 nós.

A metodologia H3 constitui uma abordagem alternativa ao problema de optimização topológica hierárquica. No algoritmo H3, tanto as densidades macroestruturais quanto as microestruturais são variáveis do problema. Assim, na resolução do problema global calcula-se as densidades macroestruturais, que actuam como restrições de volume para os correspondentes problemas microestruturais. A resolução dos problemas microestruturais dá origem a uma distribuição local de material. Esta permite a avaliação constitutiva a ser utilizada no correspondente elemento macroestrutural, assim como o cálculo das sensibilidades globais à evolução local. Apresentam-se na figura 9.135 topologias macroestruturais obtidas para os problemas abordados anteriormente, MH1, MH2 e MH3, resolvidos numa estrutura do tipo H3. Neste caso, utiliza-se sempre o MMA na resolução do problema global. No problema local, por sua vez, utiliza-se alternativamente o CONLIN, o MMA e o OC. Em qualquer um dos casos, é necessário equilibrar as actualizações das variáveis

macro- e microestruturais. Tal como na homogeneização, trata-se sempre de oscilações locais que se sobrepõem a um campo médio global. Assim, faz neste caso sentido permitir actualizações mais agressivas na microescala, para permitir uma resposta adequada às variações macroestruturais. Em contrapartida, deve-se restringir a variação de densidade global de modo a não desestabilizar os problemas locais e manter uma evolução progressiva do processo iterativo [Coelho 2009]. Este equilíbrio tende a tornar esta configuração mais sensível à manipulação de dos parâmetros de cálculo. Em contrapartida, pode também torná-la mais flexível que as metodologias H1. Verifica-se que os valores obtidos para a função-objectivo no ponto óptimo são aproximados dos obtidos anteriormente com as metodologias H1. Na figura 9.136 comparam-se as curvas obtidas com MMA e CONLIN segundo a metodologia H1 com as curvas obtidas com CONLIN para a metodologia H3. Constata-se que a evolução é semelhante nestes casos, assim como com a utilização dos restantes métodos. Existem, no entanto, algumas diferenças no seu comportamento. Estas podem ser verificadas na evolução da restrição global de volume utilizando como metodologia local o CONLIN, o MMA e o OC (*vd.* Fig. 9.137). Observa-se aqui que a tendência geral é semelhante ao referido com os mesmos métodos noutras aplicações. No entanto, a interacção entre as diferentes escalas dá origem a algumas oscilações. O método mais estável e mais coerente em termos de resultados é o CONLIN. Na figura 9.138 pode visualizar-se a evolução dos multiplicadores de Lagrange associados às restrições locais de volume, para alguns elementos da macroescala MH1. Note-se que estes multiplicadores são usados como informação de sensibilidade para a função-objectivo do problema externo, utilizados na actualização das variáveis de densidade macroscópica. Por um lado, tal como necessário para a satisfação das condições de óptimo [Coelho 2009], constata-se que todos eles convergem para o mesmo valor em problemas locais onde a densidade macroestrutural é intermédia, *i.e.*  $0 < \rho < 1$ . Por outro lado, verifica-se que esta afirmação apenas não é verdadeira para casos onde as densidades macroestruturais encostam nos limites. Nestes casos, os multiplicadores são nulos (*e.g.* elemento  $e_x = 1$ , com  $\rho = 0$ ) ou oscilando pelo facto de tenderem a encostar no limite (*e.g.* elemento  $e_x = 5$ , com  $\rho = 1$ ). Os valores médios dos multiplicadores de Lagrange locais no óptimo são coerentes com o verificado nos restantes métodos. No entanto, o comportamento geral não é o mesmo. Nas figuras 9.139 e 9.140 apresentam-se curvas equivalentes para a utilização dos métodos de optimização local MMA e OC, respectivamente. O MMA dá origem a multiplicadores de Lagrange muito mais dispersos e com fortes flutuações, influenciando negativamente os resultados. Esta afirmação é coerente com o referido na bibliografia, onde o MMA nesta aplicação é definido como menos fiável que o CONLIN [Coelho 2009]. Presume-se que esta diferença de comportamento, visto, em rigor, tratar-se de uma versão com poucas alterações face à implementação original de Svanberg [Svanberg 1987], se deva à flutuação das assíptotas e para valores próximos das variáveis a actualizar, provocando oscilações mais notórias na variável dual  $\lambda$ . A utilização do OC dá origem a multiplicadores de Lagrange locais que se aproximam da média apresentada anteriormente. No entanto, nesta implementação, dão origem a alguns desequilíbrios na evolução simultânea dos problemas locais e o problema global. Estas oscilações são visíveis no comportamento dos multiplicadores de Lagrange locais e geram por vezes oscilações entre a distribuição de densidade local e a fracção volúmica efectiva dos problemas locais correspondentes, deteriorando os resultados, nomeadamente, no caso de malha macroestrutural mais refinada.

Refira-se ainda que é possível contornar a questão de indefinição de sensibilidade global quando as densidades macroestruturais encostam aos extremos. Nestes casos, todas as variáveis locais encostam também ao mesmo extremo e deixa de haver um multiplicador de Lagrange definido<sup>6</sup>. Apesar de, nesses casos, a validade da solução tender a manter-se pelo facto de ser essa a solução local efectiva e a densidade macroestrutural correspondente estabilizar, uma forma de manter multiplicadores válidos ao longo de todo o processo é impedir que as densidades macroestruturais assumam os valores 0 ou 1. Basta para isso definir limites para os valores dessas variáveis, tanto máximo quanto mínimo, limitando assim os extremos admissíveis de fracção volúmica para os

---

<sup>6</sup>Note-se que se pode ter o mesmo problema de sensibilidade global em casos de densidade intermédia, bastando para isso que todas as variáveis microestruturais de determinado problema local se encostem aos extremos, *e.g.* problema local sem técnicas de filtragem.

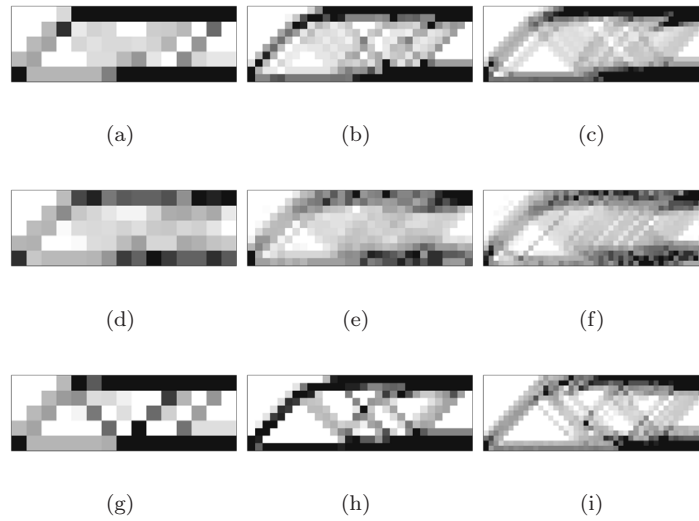


Figura 9.135: Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica, utilizando o modo de cálculo H3 e diferentes métodos de otimização na resolução dos problemas locais: (a-c) CONLIN, (d-f) MMA e (g-i) OC.

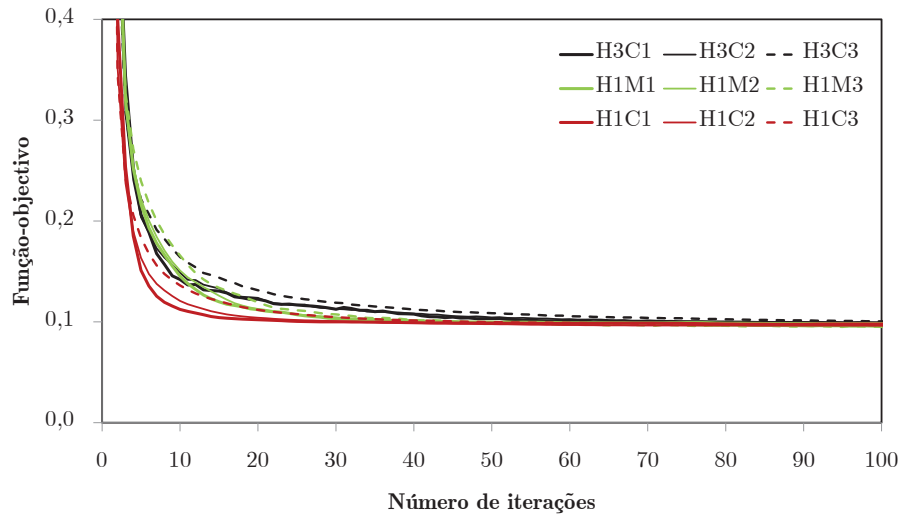


Figura 9.136: Evolução inicial da função-objetivo dos problemas de otimização topológica hierárquica, utilizando H3 com CONLIN na resolução local e H1 com MMA e CONLIN.

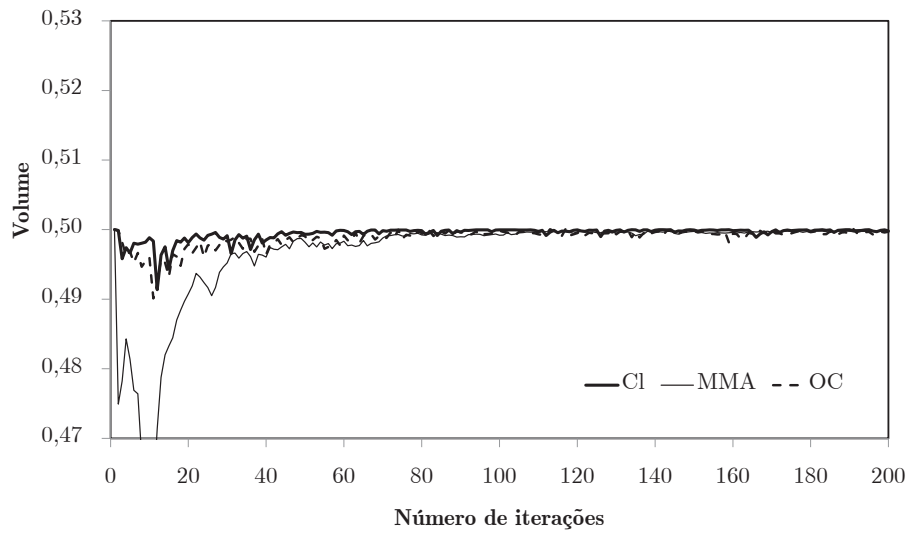


Figura 9.137: Evolução da restrição global de volume do problema MH1 de otimização topológica hierárquica, utilizando o modo H3, com CONLIN, MMA e OC na resolução dos problemas locais.

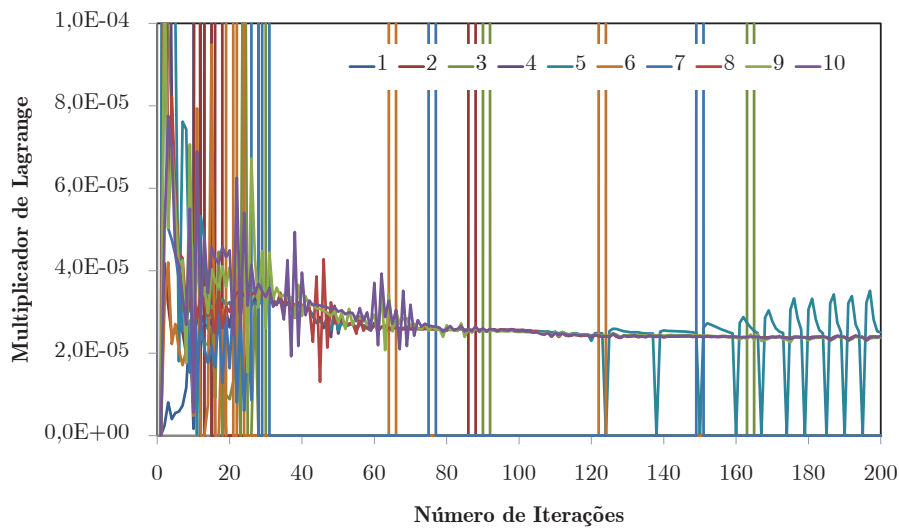


Figura 9.138: Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume,  $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e CONLIN nos problemas locais.

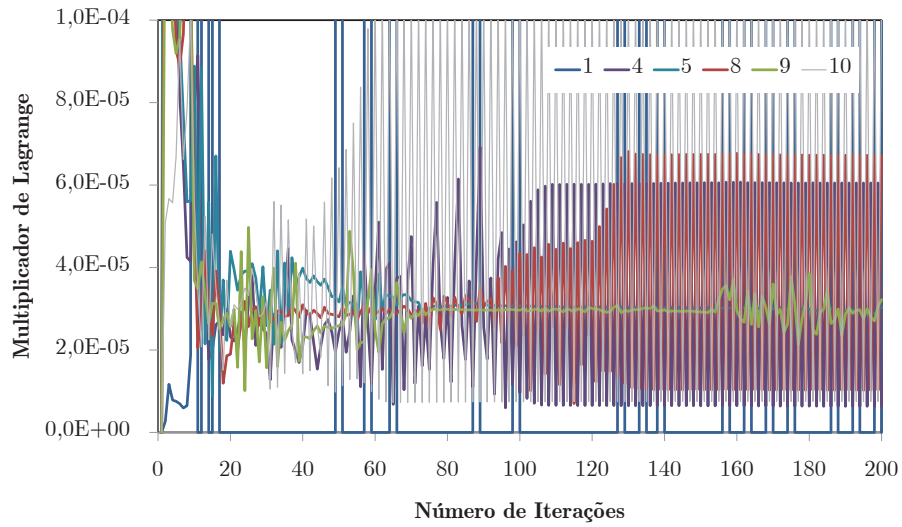


Figura 9.139: Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume,  $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e MMA nos problemas locais.

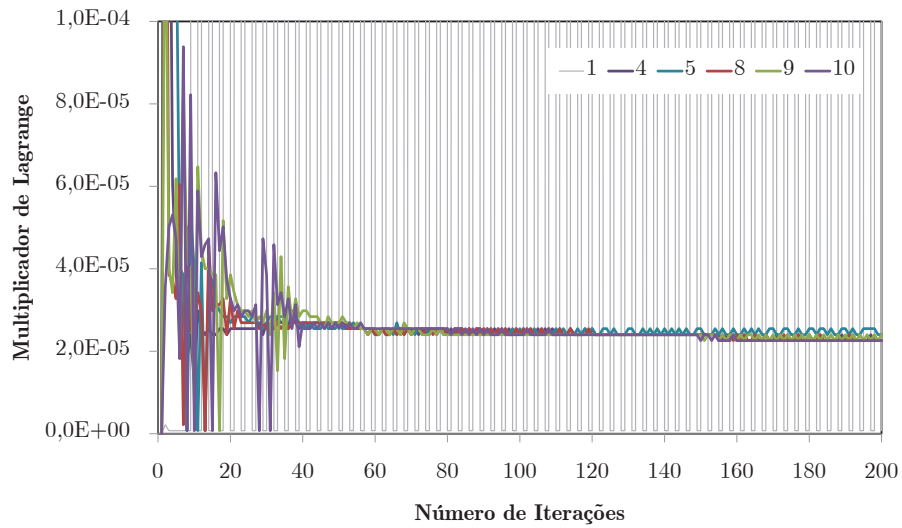


Figura 9.140: Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume,  $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e OC nos problemas locais.

problemas locais. Na figura 9.141 mostra-se, a título de exemplo, as topologias obtidas com imposição dos limites  $0,2 \leq \rho \leq 0,8$ . Note-se que a estratégia H1 não apresenta este problema associado aos multiplicadores de Lagrange locais e correspondentes sensibilidades globais, já que todas as variáveis são processadas apenas ao nível local e as densidades macroestruturais surgem apenas como variáveis dependentes. Em contrapartida, a estratégia H3 traz algumas vantagens em termos de controlo local de cada problema microestrutural, nomeadamente permitindo a inclusão de restrições adicionais independentes ao nível de cada microestrutura, por exemplo, de restrições de permeabilidade ou de perímetro [Coelho *et al.* 2008a, Coelho 2009]. Numa estratégia do tipo H1, nesta implementação, as restrições adicionais afectam sempre a estrutura como um todo. Neste trabalho foram implementadas restrições de perímetro máximo prescrito nas metodologias locais derivadas de MMA, nas estratégias H1 e H3, permitindo um controlo CRU a CRU com H3 e um controlo médio com H1.

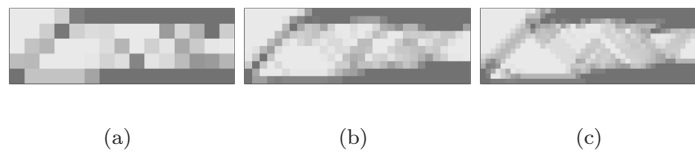


Figura 9.141: Topologias macroestruturais obtidas na optimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H3 e CONLIN nas resoluções locais, com limites de densidades macroestruturais  $0,2 \leq \rho \leq 0,8$ .

As diferentes estratégias e métodos utilizados comparam-se na figura 9.142. Apresentam-se aqui os diferentes valores de função-objectivo no ponto óptimo compararam-se os valores da função-objectivo para os diferentes métodos, incluindo ainda resoluções com diferentes refinamentos da malha da microescala. Utiliza-se como referência o valor obtido com a estratégia H1, utilizando o método MMA com o parâmetro  $s_0$  variável (H1.MMAv). Em primeiro lugar, constata-se que as diferenças em termos de função-objectivo, mesmo em relação às discretizações mais grosseiras, são reduzidas. Verifica-se também que, em termos gerais, o refinamento da malha macroestrutural, como esperado, traz benefícios a este nível. Podem ainda tirar-se diversas conclusões adicionais. Os resultados obtidos com o modo de cálculo H1 são globalmente melhores que os obtidos com H3. Neste caso, destaca-se pela negativa e pelas razões já referidas o cálculo com recurso ao método MMA na actualização das variáveis de densidade nos problemas locais. Resultado aparentemente negativo é apresentado também pela utilização de elementos quadráticos na macroescala (H1.Q). No entanto, o facto de se obterem pontos de mínimo com função-objectivo um pouco mais elevada devem-se essencialmente à inexistência de fenómenos *checkerboard* nestes casos. A influência desta questão é tanto maior quanto menos refinada é a malha macroestrutural, já que são as conectividades entre elementos lineares de densidade elevada pelos vértices que dão origem a problemas de rigidez artificial. Quanto à resolução com recurso a CRU mais refinadas, verifica-se algo que já foi referido neste capítulo, as soluções locais tendem para topologias simples. Constata-se que um maior refinamento local dá origem a topologias com maior detalhe mas essencialmente da mesma natureza, conduzindo a propriedades homogeneizadas e sensibilidades locais de onde se obtém resultados muito aproximados. Ainda assim, observa-se um ligeira melhoria quando comparados com os resultados equivalentes de células menos refinadas. A utilização de malhas locais demasiado grosseiras, como é o caso da malha de  $10 \times 10$  elementos, leva a piores resultados e altera a solução, como esperado, pelo facto de haver dificuldades em caracterizar o detalhe necessário para a solução óptima [Rodrigues *et al.* 2002]. Todas as diferenças referidas são mais acentuadas quando o problema global é constituído por poucos elementos. Nestes casos, é forçosamente o nível de detalhe da microescala que pode ou não melhorar a resposta global da estrutura. Note-se ainda que o maior detalhe microestrutural origina uma tendência menos acentuada para gerar efeitos

*checkerboard* na macroescala, com soluções globais caracterizadas por mais densidades globais de valor intermédio. Interpreta-se esta característica como estando associado ao maior número de variáveis locais e a uma resposta mais lenta da actualização de topologias locais e, consequentemente, uma menor tendência para estas encostarem aos extremos ( $\rho = 0$  ou  $\rho = 1$ ). Este é um fenómeno que ocorre também em problemas 3-D, caracterizados por uma quantidade ainda maior de variáveis locais. Estas questões podem ser ilustradas recorrendo às figuras 9.143. Mostram-se aqui as soluções macroestruturais para os problemas apresentados, utilizando microestruturas com diferentes níveis de refinamento ( $10 \times 10$ ,  $20 \times 20$ ,  $30 \times 30$  e  $40 \times 40$  elementos).

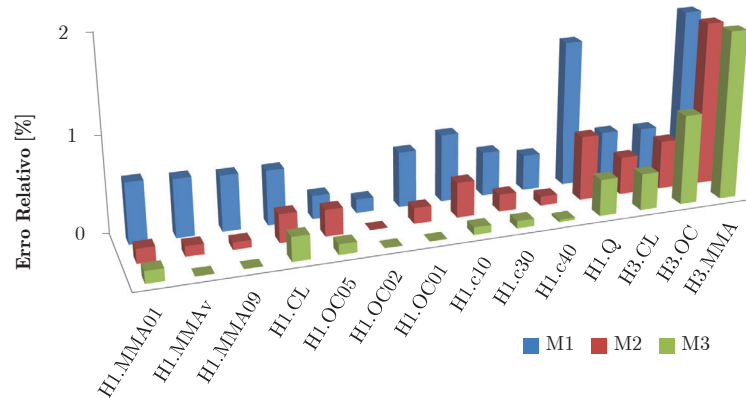


Figura 9.142: Erro relativo para diferentes modos de cálculo e métodos de optimização na resolução de problemas de optimização topológica hierárquica.

Com carácter acessório, referem-se apenas alguns pontos adicionais. A não-utilização de filtros de densidade na microescala leva a comportamentos distintos. Nas metodologias H1 (*vd.* Fig. 9.144), à semelhança do que acontece na homogeneização inversa, o nível de ruído (*checkerboards*) nas soluções locais não é muito elevado, mas estas estabilizam prematuramente com o encostar de densidades locais aos extremos. Isto leva a que os problemas atinjam a paragem, mesmo com critérios apertados, muito cedo. Isto tende ainda a acontecer em fracções volúmicas intermédias, tornando as soluções macroestruturais bastante menos definidas do que as correspondentes utilizando filtros. No que diz respeito metodologias do tipo H3 (*vd.* Fig. 9.145), apresentam-se alguns problemas de estabilidade. Por um lado, mantém-se a mesma tendência para encostar aos extremos. Por outro lado, em vez de uma paragem prematura é comum atingirem-se níveis de oscilação que podem mesmo levar à divergência do problema. Nestes casos, à medida que as soluções microestruturais estabilizam de forma agressiva em soluções discretas, as variáveis macroestruturais perdem informação de sensibilidade e desestabilizam em termos de actualização. Este efeito, por sua vez, leva à imposição de restrições de volume incoerentes com o estado limite da microestrutura correspondente, levando a oscilações entre os campos macroestrutural e microestrutural. A título de exemplo, ilustram-se ainda na figura 9.146 as topologias obtidas para os problemas abordados nesta secção, resolvidos com o modo H1 e MMA, mas utilizando CRU hexagonais. Utilizou-se para o efeito uma CRU com 450 elementos finitos quadriláteros lineares.

Conclui-se este capítulo ilustrando algumas das soluções locais obtidas nos problemas resolvidos ao longo da presente secção. Na figura 9.147 comparam-se as topologias globais e locais para os problemas MH1 resolvidos em H1 com MMA e uma CRU de  $20 \times 20$  elementos, com e sem filtros de sensibilidade. Na figura 9.147 apresentam-se as topologias globais e locais para os problemas MH1, resolvidos com os mesmos métodos, mas utilizando CRU quadradas de  $10 \times 10$  e  $40 \times 40$  elementos finitos, assim como uma CRU hexagonal com 450 elementos. Observa-se que as malhas locais mais grosseiras originam ocasionais falhas de periodicidade. Estas devem-se a dificuldades

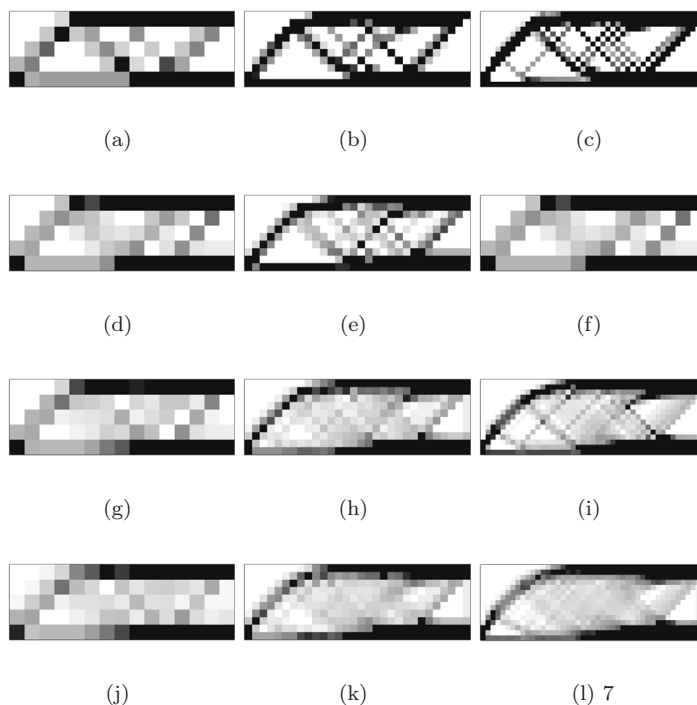


Figura 9.143: Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1, com MMA de  $s_0$  variável, e diferentes níveis de refinamento na malha microestrutural: (a-c)  $10 \times 10$ , (d-f)  $20 \times 20$ , (g-i)  $30 \times 30$  e (j-l)  $40 \times 40$ .

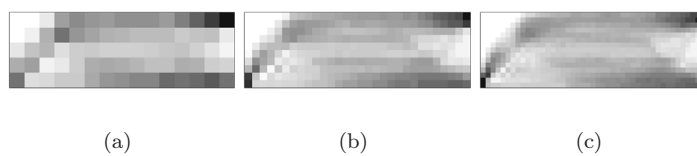


Figura 9.144: Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA sem filtragem de sensibilidades locais.



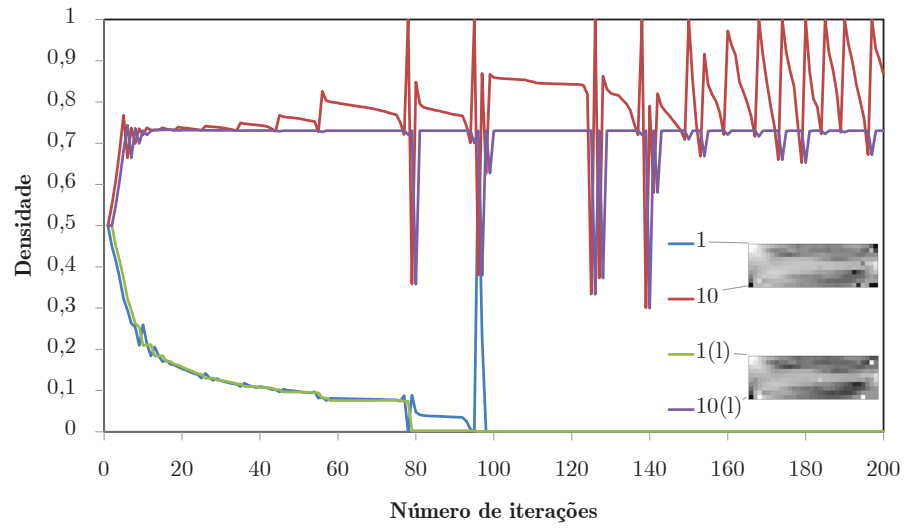


Figura 9.145: Evolução das densidades de dois elementos macroestruturais e da fracção volúmica local correspondente (l).

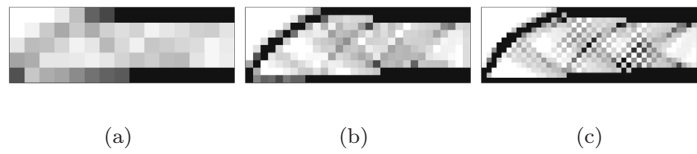
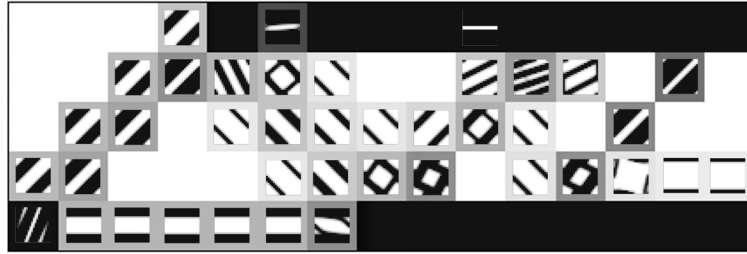
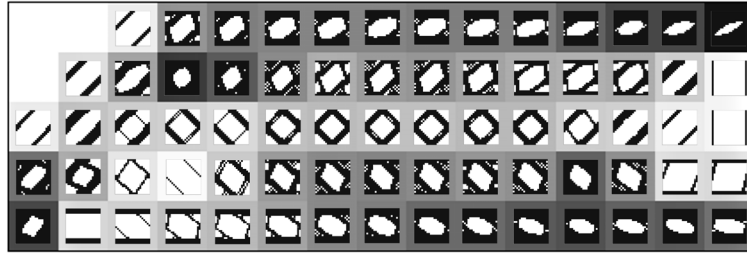


Figura 9.146: Topologias macroestruturais obtidas na optimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA com CRU hexagonais.

de representar detalhe suficiente, assim como à margem reduzida para respeitar o volume previsto. No caso da CRU hexagonal, a este factor acresce uma acentuada dependência de malha, com as opções tomadas na geração estruturada a afectar claramente algumas topologias.

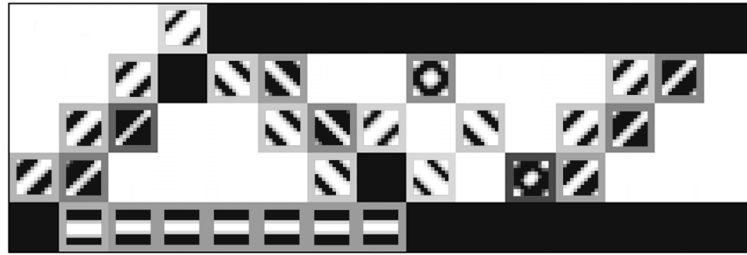


(a)

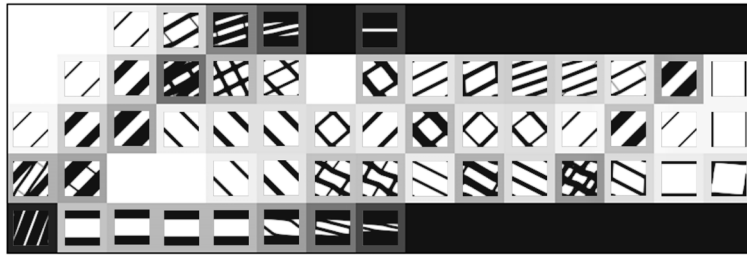


(b)

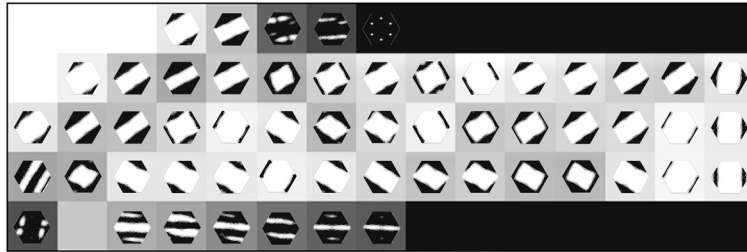
Figura 9.147: Ilustração de solução global e soluções locais para o problema de optimização topológica hierárquica, modo H1 e MMA, utilizando uma CRU com  $20 \times 20$  elementos: (a) com e (b) sem filtragem de densidades locais.



(a)



(b)



(c)

Figura 9.148: Ilustração de solução global e soluções locais para o problema de optimização topológica hierárquica, modo H1 e MMA, utilizando CRU alternativas: (a) quadrada com  $10 \times 10$  elementos, (b) quadrada com  $40 \times 40$  elementos e (c) hexagonal com 450 elementos,

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Capítulo 10

# Desempenho em Processamento Paralelo

*Analisa-se o desempenho do programa mainFRAN na execução de problemas em paralelo no cluster TaranTux. Comparam-se diferentes abordagens no cálculo paralelo envolvendo otimização topológica e multiescala.*

---

### 10.1 Introdução

A dimensão e a complexidade dos problemas de otimização topológica têm tido um crescimento que leva a que a constante evolução de desempenho dos recursos computacionais seja por vezes insuficiente para tornar a sua resolução menos onerosa em termos de tempos de processamento. Para além de outras estratégias utilizadas neste trabalho para limitar os requisitos computacionais destes problemas, aborda-se neste capítulo o processamento paralelo como uma possível resposta para esta questão. Neste sentido, começa-se por fazer uma análise geral do problema de elementos finitos, para o problema de elasticidade linear, analisando o desempenho das principais partes de um programa de resolução. Posteriormente, esta análise é enquadrada numa plataforma de resolução de problemas de otimização topológica. Neste caso, avalia-se novamente o desempenho de diferentes partes do cálculo em computação paralela.

A parte final deste capítulo aborda problemas de otimização topológica multiescala, especificamente de estratégias hierárquicas. Estes problemas apresentam desafios computacionais interessantes, quer pela sua dimensão quer pela sua estrutura. Neste sentido, apresentam-se aqui duas abordagens distintas de cálculo concorrente. Analisa-se uma abordagem paralela dos problemas, com cada uma das partes executadas em paralelo por diferentes processadores. Analisa-se ainda uma abordagem distribuída do problema. Espera-se que, neste caso, a resolução dos problemas locais por diferentes processadores apresente um maior potencial de escalabilidade.

Opta-se por não apresentar estudos isolados de desempenho do *cluster* TaranTux, destacando-se a referência [Costa 2010] como exemplo de excelentes resultados na sua utilização.

## 10.2 Análise de Desempenho

A análise de desempenho efectuada ao longo desta secção diz respeito a um problema geral estrutural, resolvido pelo método dos elementos finitos. O problema aqui estudado é meramente exemplificativo e ilustrado na figura 10.1. Consiste num problema tridimensional constituído por 21952 elementos hexaédricos lineares, de 8 nós, com 73167 graus de liberdade. Na figura 10.1 pode ver-se uma representação das condições de fronteira, malha utilizada e deformada resultante da resolução do problema. Salienta-se que os aspectos computacionais aqui abordados são extensíveis a outros problemas executados sobre a mesma plataforma, salvo questões de condicionamento e de grão computacional.

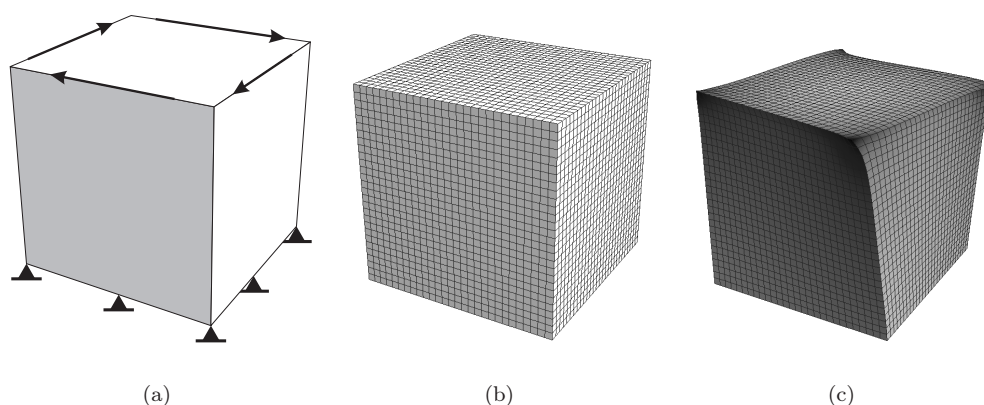


Figura 10.1: Ilustração do problema mecânico: (a) geometria e condições de fronteira, (b) malha de elementos finitos e (c) representação da deformada.

Utiliza-se como algoritmo de resolução de sistemas de equações uma implementação do Método do Gradiente Conjugado Precondicionado (PCG – *Preconditioned Conjugate Gradient*), denominada PARCONG (*PARallel CONjugate Gradient solver*) [Pinho-da-Cruz 2007]. Os ensaios foram aqui realizados (i) sem preconditionamento (SP), (ii) com o preconditionador de Jacobi (JAC), (iii) com preconditionamento de sobre-relaxação sucessiva simétrica (SSOR) e (iv) com a factorização incompleta de Cholesky de nível 0 (IC0). Os tempos relativos à utilização de cada esquema de resolução são apresentados na tabela 10.1. As condições de fronteira foram impostas com métodos de penalidade, utilizando uma penalidade  $w_p = 10^4$ . A tolerância utilizada para a convergência do PC foi  $10^{-8}$ . O preconditionador SSOR apresenta os tempos de processamento mais reduzidos. Este preconditionador é, por isso, utilizado durante este trabalho em todos os cálculos efectuados em série. Contudo, neste capítulo utiliza-se preferencialmente o preconditionador IC0, de factorização incompleta de Cholesky de nível 0. Apesar de ser mais complexo de paralelizar, este preconditionador pode originar uma factorização mais escalável. Além disso, tende a melhorar o condicionamento dos sistemas envolvidos [Borrvall e Petersson 2001]. O maior tempo de execução é originado por uma factorização mais morosa. No entanto, traz benefícios em problemas menos bem-condicionados e em problemas de maiores dimensões. Em termos de análise de desempenho paralelo, a maior estabilidade e um número de iterações mais reduzido justifica esta opção. A figura 10.2 ilustra este aspecto, mostrando a evolução do resíduo relativo<sup>1</sup>,  $R_r$ , ao longo da resolução do sistema de equações.

Procede-se então à resolução do mesmo problema em paralelo. Utilizou-se o *cluster* TaranTux, recorrendo a 12 processadores. Para o efeito, consideram-se três parcelas essenciais num problema

<sup>1</sup>O resíduo relativo,  $R_r$ , é a norma do vector de resíduos do método do gradiente conjugado,  $\|r(k)\|$ , adimensionalizada com a norma do vector de resíduos inicial,  $\|r(0)\|$ .

Tabela 10.1: Tempos de processamento do algoritmo de resolução do sistema de equações lineares sem e com preconditionamento.

Precondicionamento	SP	JAC	SSOR	IC0
Tempo de resolução [s]	121,31	33,07	12,76	52,36
Tempo de relativo [%]	100	27,3	10,5	43,2

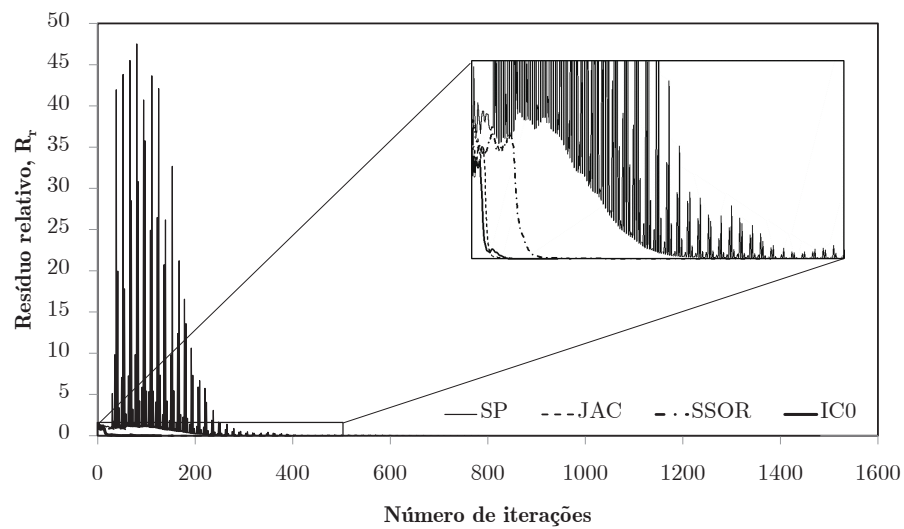


Figura 10.2: Resíduos relativos na resolução de um sistema de equações com o método do gradiente conjugado, sem e com preconditionadores.

de elementos finitos: (i) a resolução do sistema de equações, (ii) a construção da matriz de rigidez global e (iii) os procedimentos restantes. Consideram-se apenas os tempos até à obtenção da solução do problema, excluindo tarefas de pós-processamento. Os tempos obtidos resumem-se na tabela 10.2. No gráfico da figura 10.3 mostra-se a evolução do tempo de cálculo com o número de processadores,  $n_p$ . Apresenta-se esta evolução para diferentes parcelas. Note-se a redução dos tempos de computação para o tempo total, graças às reduções nas parcelas de construção do sistema de equações e sua resolução. Note-se ainda que não existe redução do tempo restante, representando uma componente claramente de série do processamento. Estas considerações são mais evidentes quando se consideram os indicadores de desempenho em processamento paralelo. A figura 10.4 mostra a evolução do *speed-up*,  $S_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ . Verifica-se que a parcela correspondente a tarefas efectuadas maioritariamente em série mantém um *speed-up* em torno da unidade, tendendo até a reduzir ligeiramente devido às tarefas de gestão e dimensionamento adicionais em cálculo paralelo. No extremo oposto do espectro, como esperado, encontra-se a construção do sistema de rigidez. Neste caso, o facto de cada porção do sistema ser construída de forma completamente independente no processador correspondente aos elementos que lhe dizem respeito traduz-se num processo perfeitamente escalável. Resultados satisfatórios foram também obtidos para a resolução do sistema de equações e, consequentemente, para o desempenho global do problema. Aqui o desempenho é sublinear, mas com um decaimento reduzido. A eficiência,  $e_p$ , do algoritmo de resolução do sistema de equações, cuja variação se encontra ilustrada na figura 10.5, tem um mínimo de 0,76. Note-se que a eficiência do processo global é sempre ligeiramente inferior à da etapa de resolução do sistema de equações devido ao aumento do peso relativo das etapas de processamento em série. Este efeito é melhor ilustrado na figura 10.6. Mostra-se aqui que o peso relativo de cada uma das parcelas de cálculo depende directamente da sua eficiência em paralelo. Assim, enquanto a construção do sistema de equações vai representando uma parcela cada vez menor no tempo de execução, a redução gradual de eficiência da parte do problema executada em série leva a que seja cada vez mais relevante em termos de tempo total de execução. Salientam-se as referências [Pinho-da-Cruz 2007, Costa 2010], em que os autores utilizam o programa COMMA3D [Pinho-da-Cruz 2007], no qual foi originalmente desenvolvido e implementado o algoritmo PARCONG de resolução do sistema de equações utilizado neste trabalho, e onde o seu comportamento conduz a eficiências ainda superiores. Estas diferenças poderão dever-se essencialmente a questões de portabilidade, compilação e estrutura geral dos programas envolvidos.

Tabela 10.2: Tempos e respectivas fracções de processamento das principais partes da resolução do problema pelo método dos elementos finitos.

	Total	Resolução	Rigidez	Outros
Tempo de resolução [s]	67,06	52,36	13,71	0,99
Tempo relativo [%]	100	78,1	20,4	1,5

Na figura 10.7 mostra-se a distribuição de elementos pelos diferentes processadores, resultante da decomposição de domínio realizada com recurso à livraria METIS [Karypis e Kumar 1998]. Refira-se o facto de na versão utilizada (4.0) ser comum utilizar-se um algoritmo diferente para números de processadores inferiores a 8, razão pela qual os indicadores de desempenho tendem a sofrer alterações na sua tendência de evolução a partir de  $n_p = 8$ .

### 10.3 Optimização Topológica

A maior parcela de processamento num problema de optimização topológica é usualmente consumida pela parte de análise do problema, neste caso com a resolução do problema de elementos finitos [Bendsøe e Sigmund 2003, Amir e Sigmund 2010]. Neste sentido, procede-se nesta secção à verificação da influência da resolução em paralelo deste problema no desempenho global de problemas de optimização topológica. Para o efeito, procede-se à optimização do problema apresentado



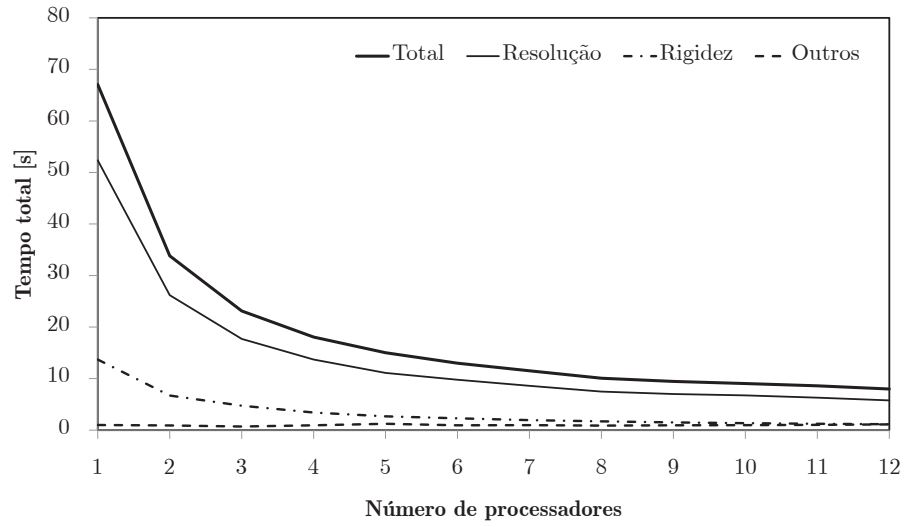


Figura 10.3: Variação do tempo total de resolução do problema em função do número de processadores,  $n_p$ .

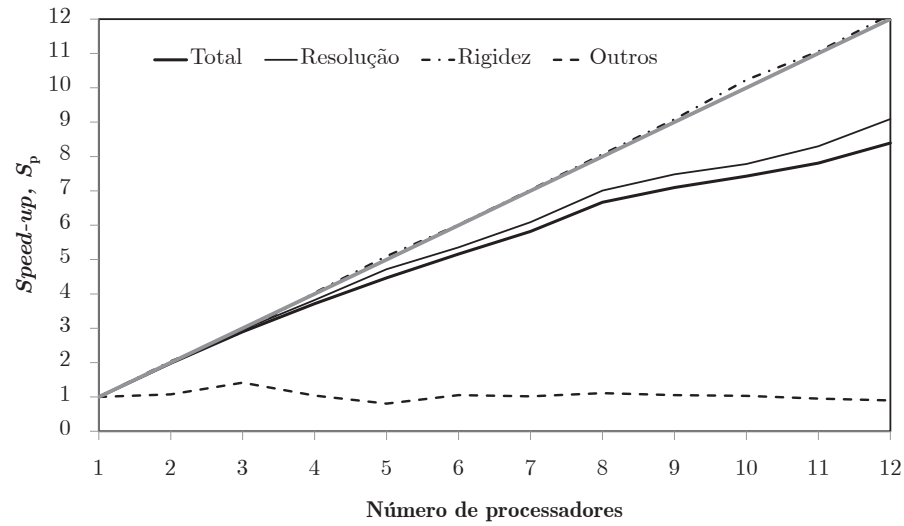


Figura 10.4: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ .

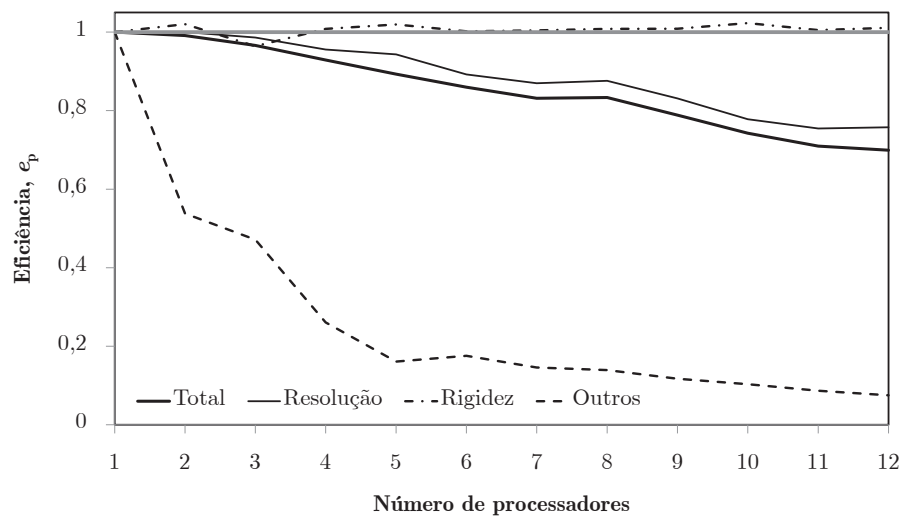


Figura 10.5: Evolução da eficiência,  $e_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ .

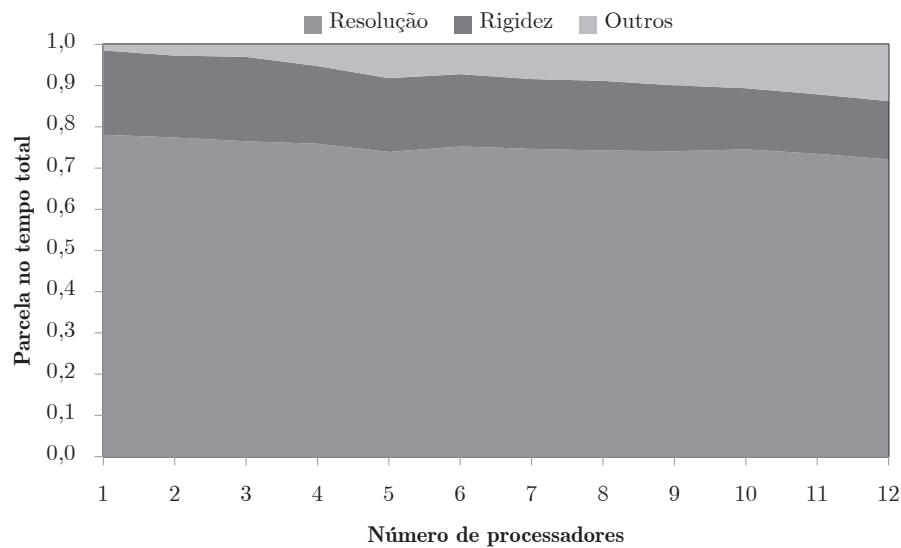


Figura 10.6: Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores,  $n_p$ .

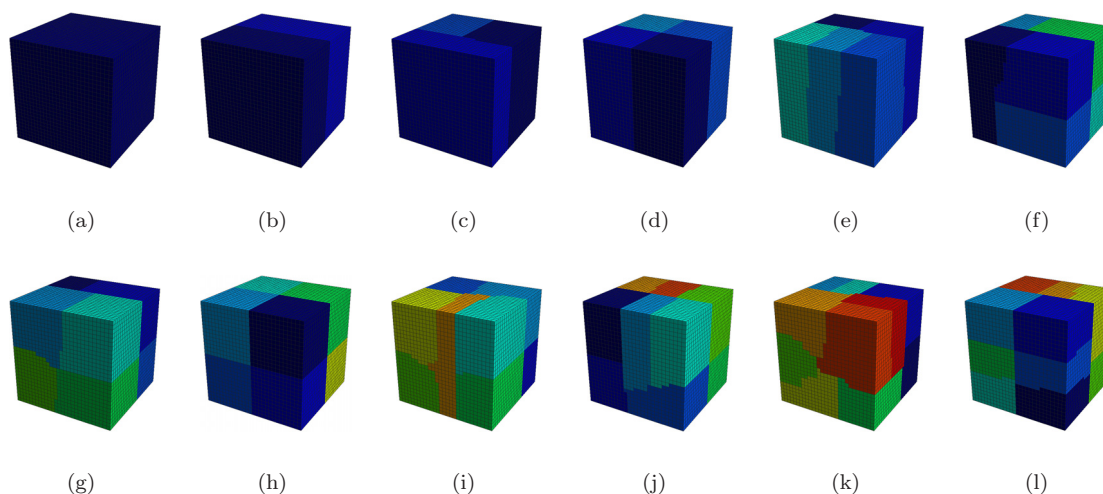


Figura 10.7: Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, consecutivamente, de 1 a 12 processadores.

anteriormente (*vd.* Fig. 10.1). As resoluções dos sistemas de equações associados foram efectuadas segundo as condições já referidas. A construção de cada sistema de equações pressupõe a definição das matrizes elementares apenas na primeira iteração. Estas são depois armazenadas em memória e afectadas pelo esquema de interpolação de densidade ao longo do processo iterativo. Para efeitos de uniformização, todas as análises de desempenho realizadas deste ponto em diante consideram apenas as primeiras 25 iterações do processo de optimização.

### 10.3.1 Optimização Topológica Sem Filtro

Numa primeira abordagem do problema, este é executado sem qualquer técnica de controlo de instabilidade numérica. Utiliza-se um modelo SIMP de material e vazio, com uma penalização  $p = 3$ , e é imposta uma fracção volúmica  $f_v = 0,4$ . A distribuição de material obtida mostra-se na figura 10.8.

Em termos de desempenho, este problema é executado em paralelo nos tempos apresentados na figura 10.9. Acrescenta-se, neste caso, o tempo associado às tarefas de optimização (análise de sensibilidades e função-objectivo, e actualização de variáveis). Note-se o reduzido peso destas tarefas no processamento do problema, razão pela qual são neste trabalho executadas em série no nó mestre. Estas tarefas mantêm um tempo de computação constante em paralelo, mas, apesar disso, é perceptível a redução gradual do tempo total de processamento com o aumento do número de processadores. Os valores de *speed-up* relativos à resolução do problema em análise mostram-se na figura 10.10. Salientam-se aqui as evoluções de desempenho da construção do sistema de equações e da sua resolução como sendo idênticas ao caso geral, ao mesmo tempo que as tarefas executadas em série não apresentam evoluções com o aumento do número de processadores. Por esta razão, o desempenho global mantém-se elevado, mas reduz-se face ao caso anterior. Este efeito é também perceptível no gráfico correspondente às eficiências (*vd.* Fig. 10.11). Atente-se ainda na evolução do peso relativo das diferentes parcelas de processamento, representada na figura 10.12. A maior parcela nos requisitos gerais de processamento é da responsabilidade das resoluções do sistema de equações, especialmente para poucos processadores. Compare-se também o peso relativo das tarefas de construção dos sistemas de equações deste caso com o apresentado na figura 10.6. Esta redução deve-se ao facto da definição elementar e da assemblagem serem feitas de forma simplificada

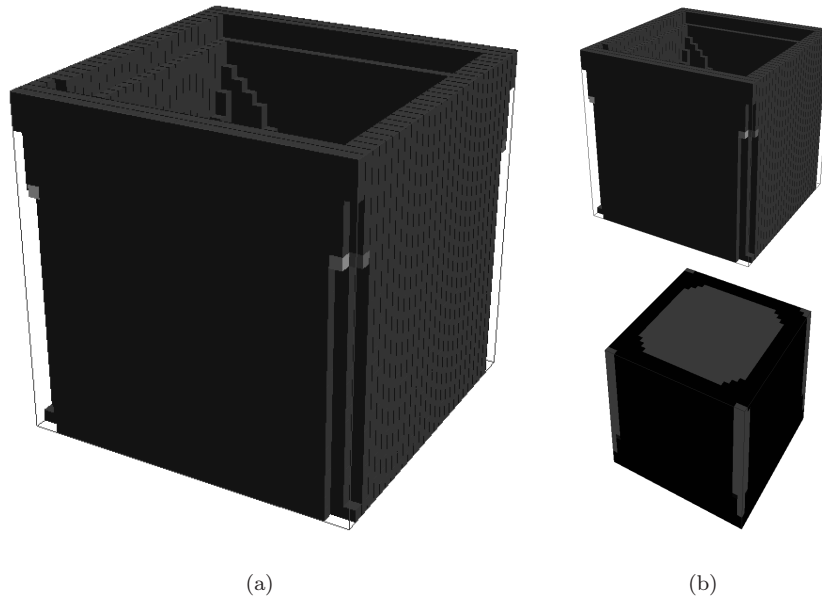


Figura 10.8: Distribuição óptima não-filtrada de material para um problema de otimização topológica: (a) topologia geral e (b) representações superior e inferior alternativas.

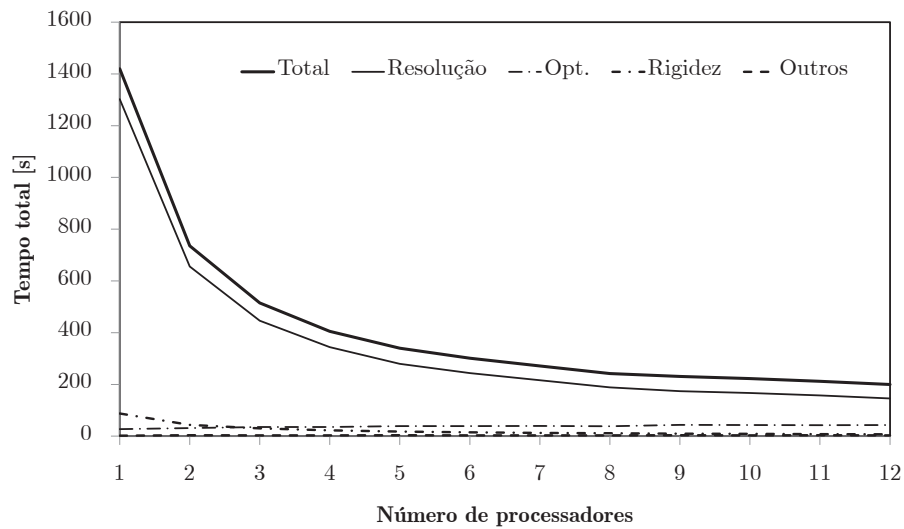


Figura 10.9: Variação dos tempos de resolução no problema de otimização topológica em função do número de processadores,  $n_p$ .

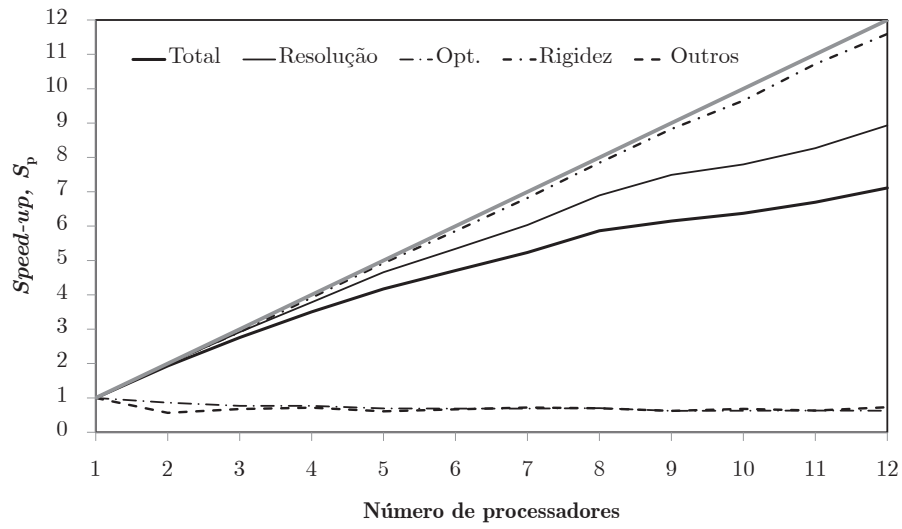


Figura 10.10: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de otimização topológica.

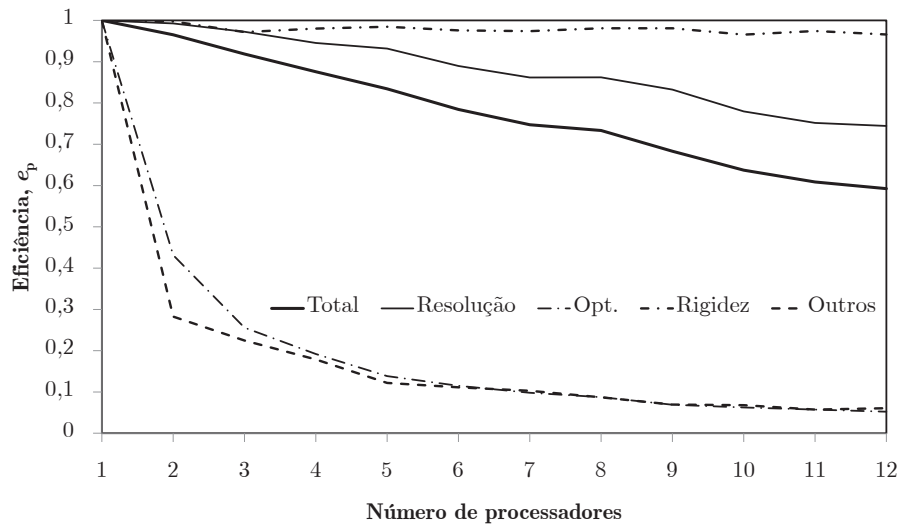


Figura 10.11: Evolução da eficiência,  $e_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de otimização topológica.

depois da primeira iteração. As tarefas associadas a procedimentos de optimização, por sua vez, têm um peso reduzido, apesar de este ir gradualmente aumentando em termos relativos com as reduções de tempo de processamento das tarefas executadas em paralelo. Apesar de contemplarem, neste caso, algumas operações de pós-processamento intermédio, as tarefas restantes têm um peso residual no desempenho global deste problema de optimização.

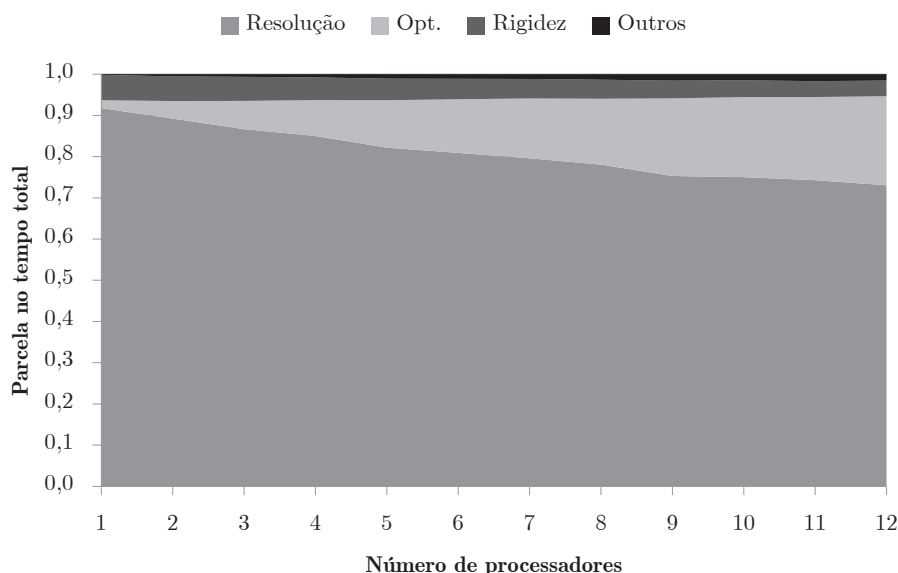


Figura 10.12: Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de optimização topológica.

### 10.3.2 Utilização de um Filtro de Sensibilidades

Apesar da estrutura óptima representada na figura 10.8 não apresentar problemas notórios de instabilidade numérica, resolveu-se o mesmo problema utilizando um filtro de sensibilidades. Assim, recorreu-se a um filtro de conectividade (F2) com um raio relativo elementar de 1,5, conduzindo à distribuição de material ilustrada na figura 10.13. Sabendo de antemão que o recurso a estratégias de filtragem de sensibilidades (ou de densidades) pode ser representativo em termos de processamento, procede-se à análise das diferentes partes das tarefas de optimização envolvidas no problema. Na figura 10.14 apresentam-se os tempos de processamento de cada parte do problema de optimização. As tarefas de optimização são apresentadas em termos totais (Opt.) e divididas nas parcelas de análise de sensibilidades e função-objectivo (F.O./Sens.), filtragem de sensibilidades (Filtros) e actualização de variáveis (Act.). É imediatamente perceptível, especialmente se se compararem as curvas obtidas com os exemplos anteriores, que a maior parcela de processamento em tarefas de optimização corresponde, nesta implementação, às operações relacionadas com a aplicação de filtros. Note-se ainda que uma parte considerável do tempo consumido surge na primeira iteração. Nesta implementação, a malha de elementos finitos é avaliada de modo a gerar, para cada elemento, a distância aos restantes elementos, conectividades entre elementos e avaliação de vizinhanças. Os requisitos desta avaliação crescem geometricamente com o número de elementos, tornando-a gradualmente dominante em termos de processamento. Por esta razão, como se pode verificar na análise do *speed-up* deste problema (*vd.* Fig. 10.15), o desempenho do problema é francamente deteriorado com a utilização desta técnica de filtragem de sensibilidades. Note-se que, face aos resultados obtidos sem filtragem, há um evidente descolar do desempenho global

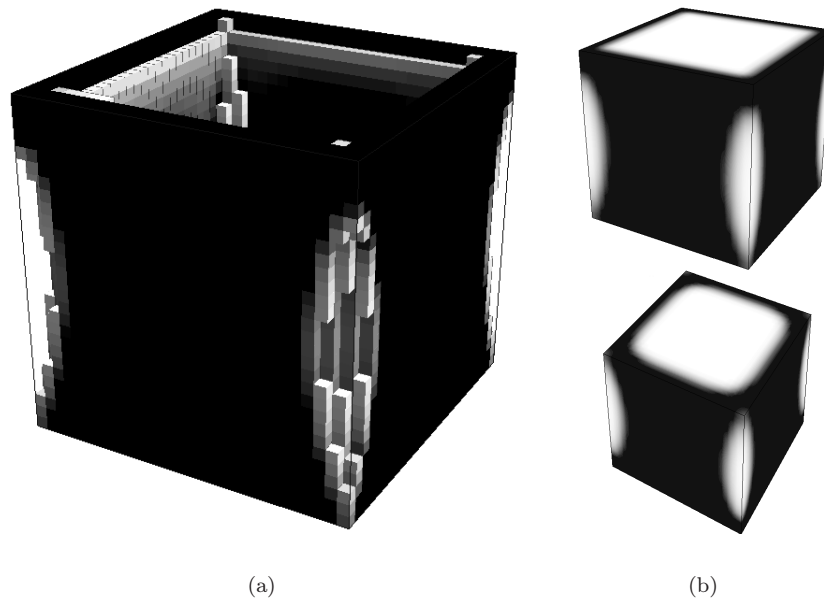


Figura 10.13: Distribuição óptima de material para um problema de otimização topológica, utilizando um filtro de sensibilidades: (a) topologia geral e (b) representações superior e inferior alternativas.

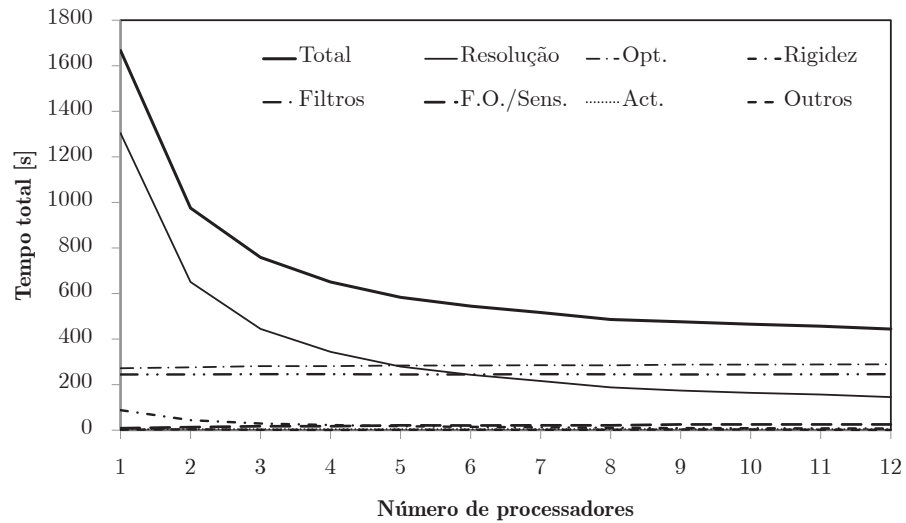


Figura 10.14: Variação dos tempos de resolução no problema de otimização topológica em função do número de processadores,  $n_p$ , utilizando um filtro de sensibilidades.

quando comparado com a tarefa anteriormente dominante, a resolução dos sistemas de equações. Este efeito é também ilustrado na figura 10.16, onde se representam as eficiências de cada parte do processamento. O processamento em série da filtragem de sensibilidades faz a eficiência global descer para 0,375 em 12 processadores, claramente inferior ao mínimo de 0,6 obtido anteriormente. A justificação para esta descida é perfeitamente ilustrada na figura 10.17. Observa-se aqui que o peso relativo desta operação vai gradualmente crescendo, sendo a segunda operação mais onerosa quando executada em série e acabando por consumir mais de 50% dos recursos computacionais para 12 processadores. Neste caso, a redução do tempo das operações relevantes executadas em paralelo leva a que o processo de filtragem se torne dominante em termos de cálculo.

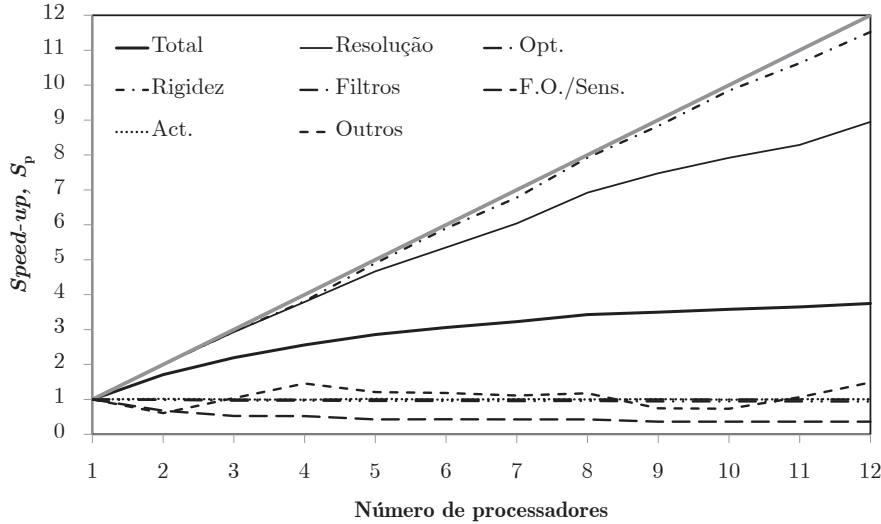


Figura 10.15: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de optimização topológica utilizando um filtro de sensibilidades.

Para resolver o problema de desempenho apresentado, opta-se por paralelizar a utilização de técnicas de filtragem. Identificada a primeira iteração e, em particular, a avaliação inicial de malha como o principal responsável por este problema, a paralelização centrou-se exclusivamente neste ponto. Para além do seu peso relativo, esta avaliação de malha tem a vantagem de poder ser efectuada de forma completamente independente, elemento a elemento, tornando-a teoricamente escalável. Os resultados obtidos são ilustrados no gráfico da figura 10.18. Os tempos de processamento passam, neste caso, a ter uma redução mais evidente do que se mostrou anteriormente. Constata-se que a parte de optimização passa a ter uma redução de tempo de processamento assinalável por actuação apenas sobre a avaliação de malha inicial, sendo a diferença entre a curva de optimização e a curva de filtragem correspondente à execução em série das restantes operações. Analisando o *speed-up* e a eficiência paralela (*vd.* Figs. 10.19 e 10.20), é possível verificar que os benefícios são assinaláveis. O desempenho da filtragem é quase perfeitamente escalável, tendo um comportamento ligeiramente sublinear apenas por influência das restantes operações de filtragem que são executadas em série. Por esta razão, o esforço suplementar de paralelização destas tarefas, na implementação aqui discutida, é perfeitamente dispensável. Por sua vez, apesar de corresponder ainda assim a tempos de processamento ligeiramente superiores, o desempenho global é neste caso superior ao obtido sem filtros, com uma eficiência mínima de 0,63. Atente-se de novo sobre os pesos relativos de cada uma das principais partes do processamento, ilustrados na figura 10.21. Neste caso, com um comportamento com elevada escalabilidade, as tarefas de filtragem de sensibilidades passam ter um impacto cada vez mais reduzido no desempenho paralelo do cálculo.

Refira-se ainda que, apesar de pouco perceptível e mantendo a mesma tendência geral, o desem-



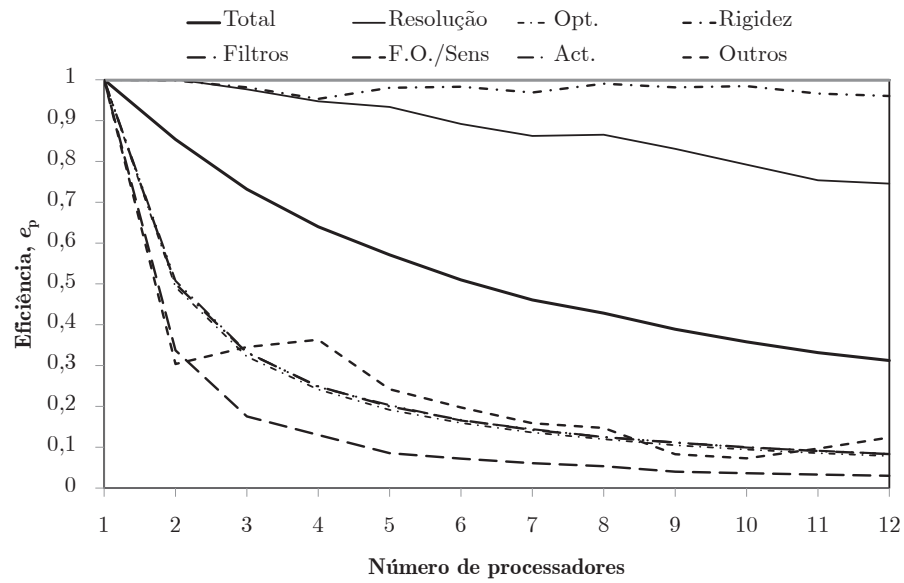


Figura 10.16: Evolução da eficiência,  $e_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de optimização topológica utilizando um filtro de sensibilidades.

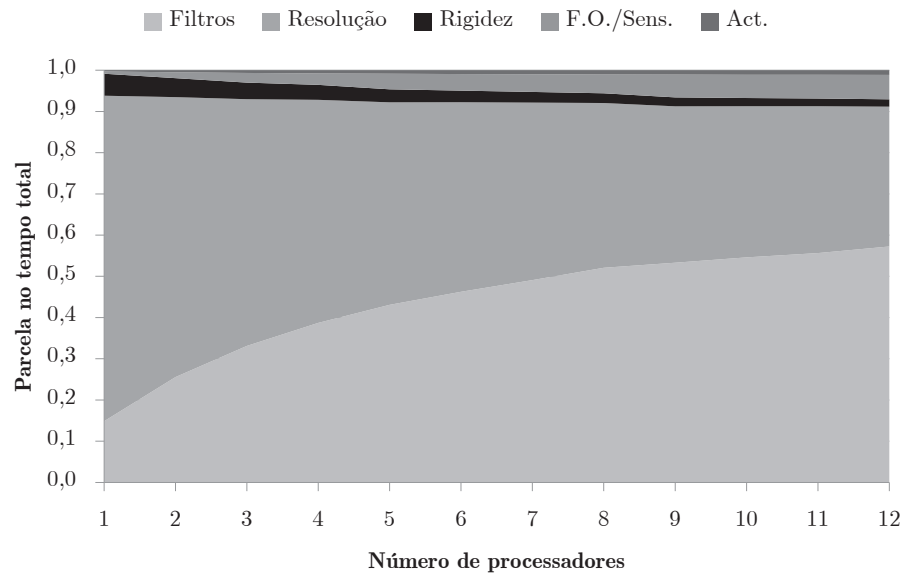


Figura 10.17: Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de optimização topológica, utilizando um filtro de sensibilidades.

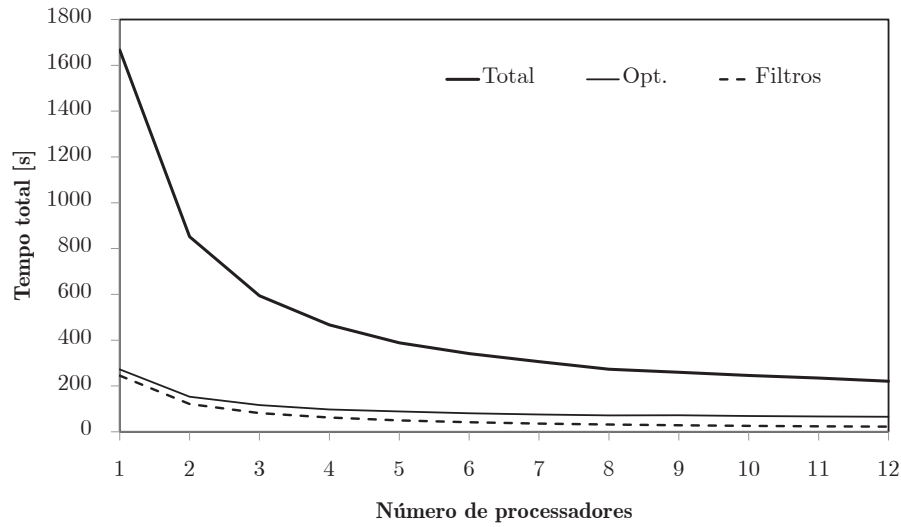


Figura 10.18: Variação dos tempos de resolução num problema de otimização topológica em função do número de processadores,  $n_p$ , utilizando um filtro de sensibilidades paralelizado.

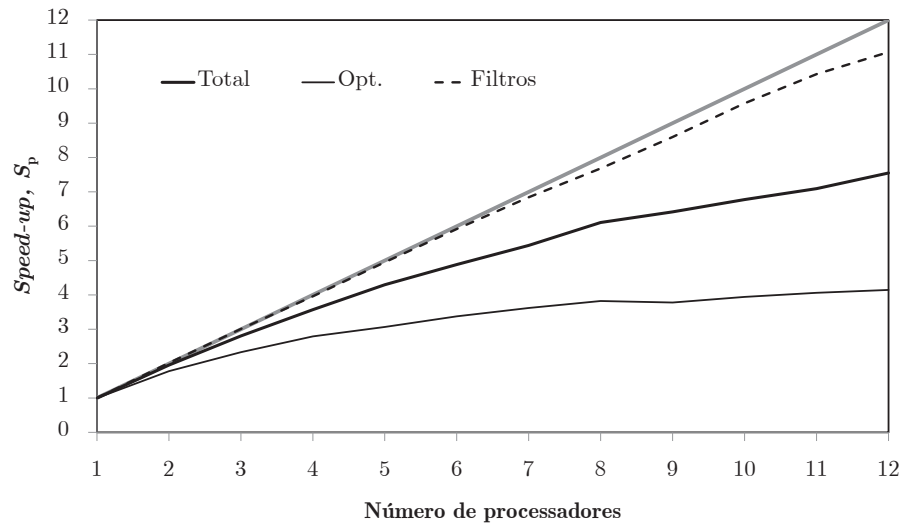


Figura 10.19: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado.

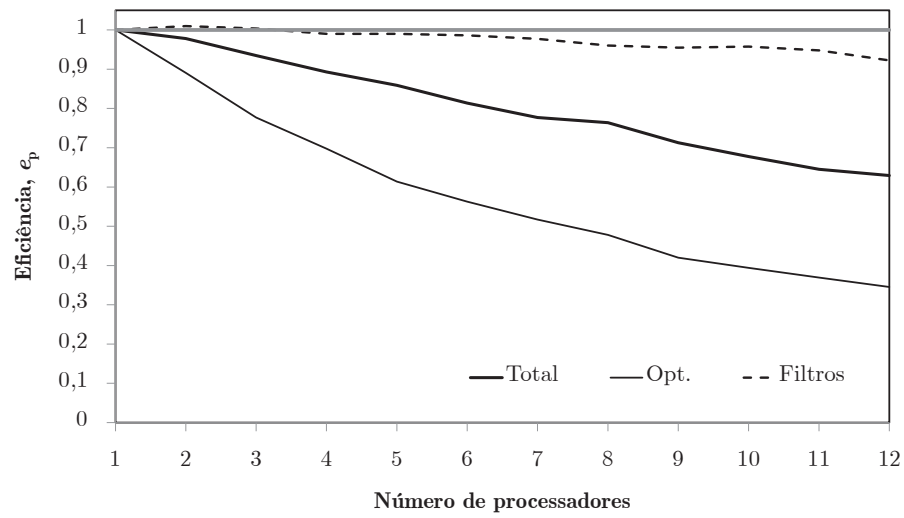


Figura 10.20: Evolução da eficiência,  $e_p$ , com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado.

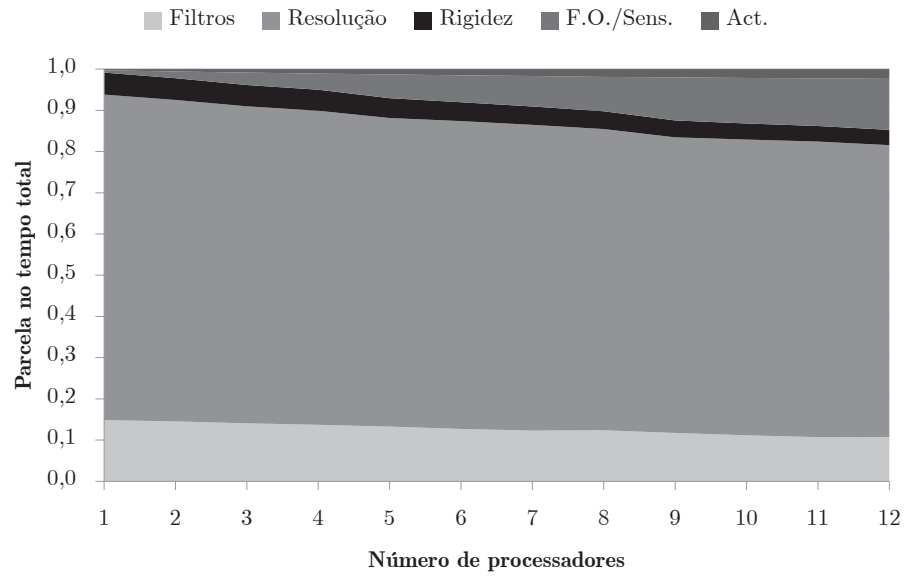


Figura 10.21: Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores,  $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado.

penho do algoritmo de resolução desceu ligeiramente nos problemas de optimização. Isto deve-se ao facto de o condicionamento dos sistemas de equações obtidos ao longo das diferentes iterações não ser necessariamente idêntico, levando a que o desempenho paralelo em cada sistema de equações resolvido não seja necessariamente idêntico. A figura 10.22 ilustra este aspecto, comparando a evolução dos resíduos do método do gradiente conjugado na resolução em série dos sistemas de equações para algumas iterações (*e.g.* 1, 2, 5, 10 e 15). Note-se que a primeira iteração, onde a densidade é constante e, consequentemente, as propriedades de cada um dos elementos idêntica, é a mais estável em termos de resolução. Este fenómeno torna-se particularmente relevante nos problemas abordados em seguida, onde as questões de condicionamento dos sistemas de equações se podem tornar incontornáveis em termos de desempenho.

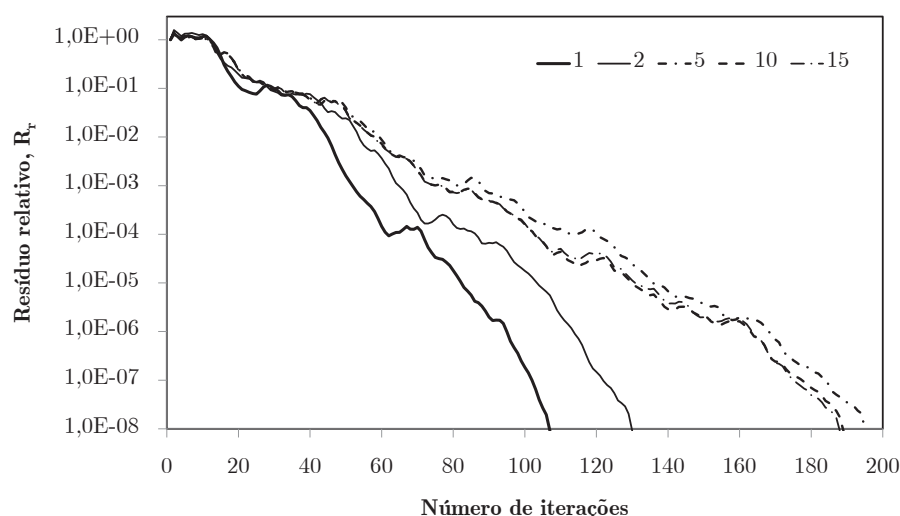


Figura 10.22: Resíduos relativos na resolução de sistemas de equações para diferentes iterações do problema de optimização topológica com o método do gradiente conjugado preconditionado.

## 10.4 Cálculo Multiescala Distribuído

Neste trabalho, os problemas cuja exigência computacional é mais evidente são os de optimização hierárquica. De facto, nestes processam-se duas escalas em simultâneo, com a resolução de um problema local de homogeneização por expansão assintótica por cada elemento da estrutura global, para além do problema global. É, assim, necessário resolver, em cada iteração, um sistema de equações do problema de elementos finitos macroestrutural e vários sistemas de equações (entre três e seis para o problema de elasticidade) por cada problema microestrutural.

Para abordar as questões relativas ao desempenho paralelo destes procedimentos, considera-se aqui o mesmo problema de torção definido na figura 10.1. No entanto, a malha de elementos finitos (hexaedros lineares) utilizada é a que se apresenta na figura 10.23(a). Esta malha de pequenas dimensões (27 elementos) foi seleccionada de modo a permitir que os tempos de resolução sejam reduzidos e que se foquem alguns aspectos relevantes nas diferentes abordagens adoptadas em seguida. A cada um destes elementos encontra-se associada a resolução de um problema local de optimização, com a discretização ilustrada na figura 10.23(b). Esta é constituída por 1000 elementos finitos (hexaedros lineares). A maior parte do tempo consumido na resolução dos problemas locais, assim como de todo o problema de optimização, é despendida na resolução dos problemas de elementos finitos associados à homogeneização por expansão assintótica. Estes

problemas de elementos finitos pressupõem a construção e a resolução de 6 sistemas de equações por cada problema local, em cada iteração.

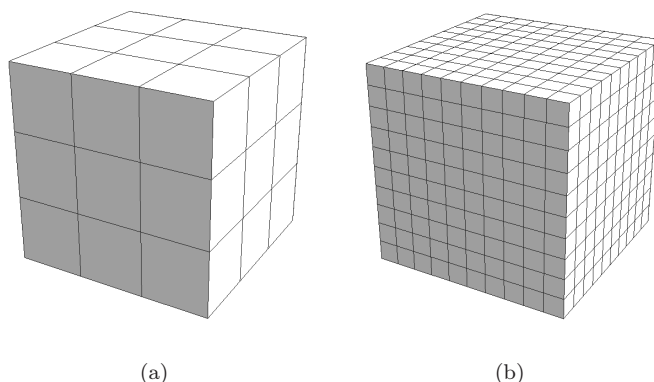


Figura 10.23: Malhas de elementos finitos utilizadas no problema de otimização multiescala 3-D: (a) problema global e (b) problemas locais.

Mostra-se na figura 10.24 a distribuição de material obtida para este problema. Note-se que existem falhas aparentes de periodicidade nos vértices superiores da figura 10.24(b). À semelhança do referido na Secção 9.4.3, este é apenas um caso de malha com pouco refinamento para representar todos os detalhes da microestrutura em causa.

Apresentam-se de seguida duas abordagens alternativas à resolução deste problema em cálculo paralelo. Por um lado, uma resolução inteiramente paralela, em que cada problema é resolvido sequencialmente em paralelo, recorrendo a todos os processadores disponíveis. Por outro lado, uma resolução vincadamente distribuída, com a separação de problemas por diferentes processadores e, sempre que possível, a sua resolução em simultâneo.

#### 10.4.1 Cálculo Paralelo e Condicionamento

Na configuração paralela do programa mainFRAN, o problema de otimização topológica hierárquica é resolvido, para além das operações efectuadas em série, sempre em paralelo. Quer isto dizer que todas as tarefas paralelas são executadas sequencialmente, com recurso aos processadores disponíveis. As partes macroestruturais do problema são resolvidas de acordo com a metodologia abordada nas secções anteriores. Cada problema local é resolvido segundo a mesma metodologia. Assim, um problema de homogeneização por expansão assintótica pressupõe a construção do sistema de equações de acordo com técnicas de decomposição de domínio e as seis resoluções deste sistema são feitas em paralelo, uma de cada vez, nos vários processadores. Os diversos problemas locais são então resolvidos em sequência, começando pelo problema relativo ao elemento finito macroestrutural  $e_x = 1$  e terminando no problema do elemento macroestrutural  $e_x = 27$ , neste caso. Os diferentes domínios, para os problemas macroestrutural e microestruturais são ilustrados, respectivamente, nas figuras 10.25 e 10.26.

O tempo de processamento, para 25 iterações, obtido na resolução deste problema é apresentado na figura 10.27. Mostra-se aqui o tempo total e o tempo de execução da segunda iteração. Considera-se, aliás, a segunda iteração nas diferentes resoluções como elemento comparativo de desempenho em diversas das análises seguintes. Refira-se ainda que o desempenho do problema macroestrutural é ignorado nestas análises, não só por ter sido abordado anteriormente mas também por ser desprezável face ao tempo total despendido neste contexto.

Os tempos de execução oscilam bastante, resultando num fraco desempenho paralelo. Considere-se como exemplo a resolução de cada um dos sistemas de equações, na segunda iteração, de

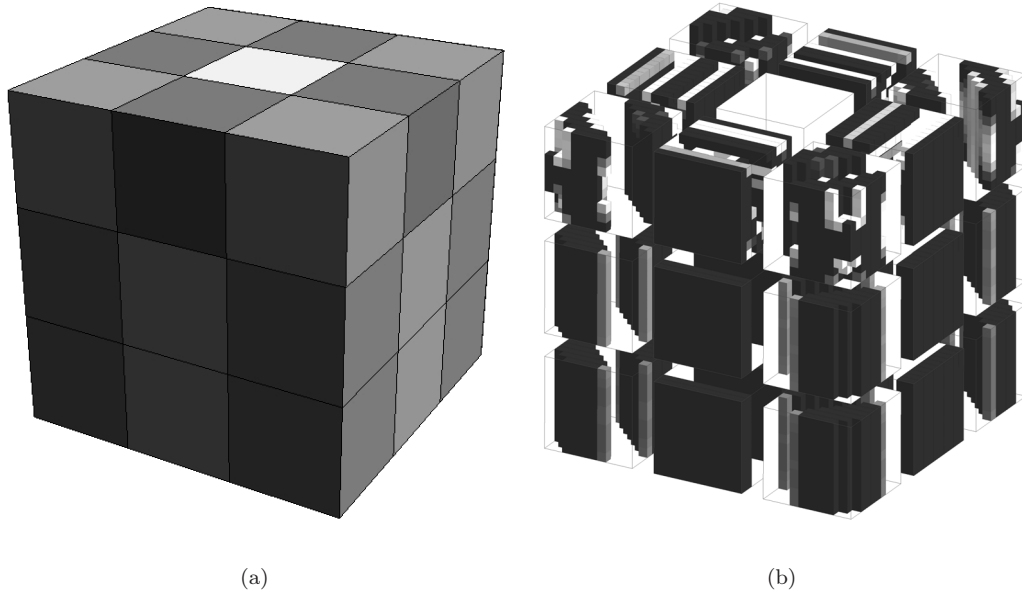


Figura 10.24: Distribuição de material óptima (a) no problema global e (b) nos problemas locais.

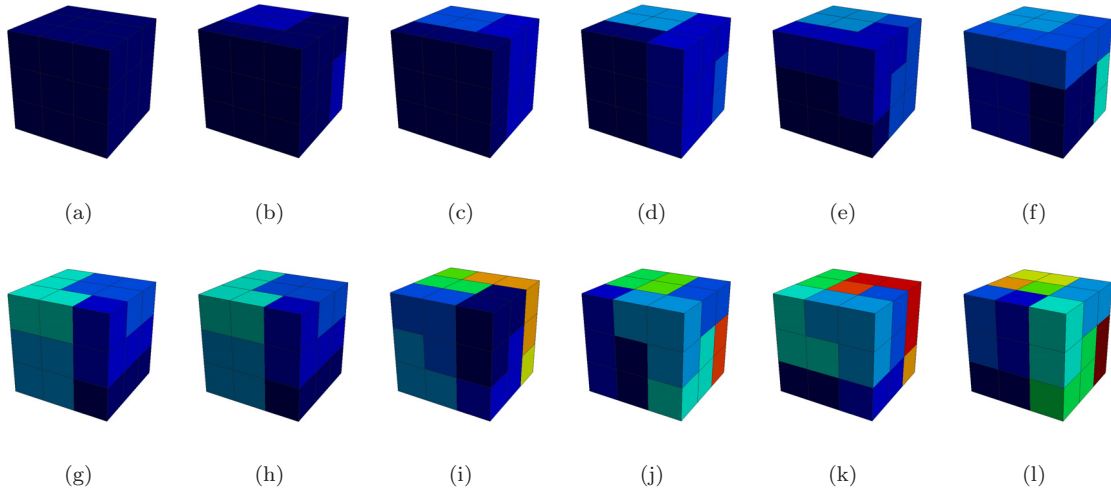


Figura 10.25: Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, de 1 a 12 processadores, para o problema macroestrutural (global).

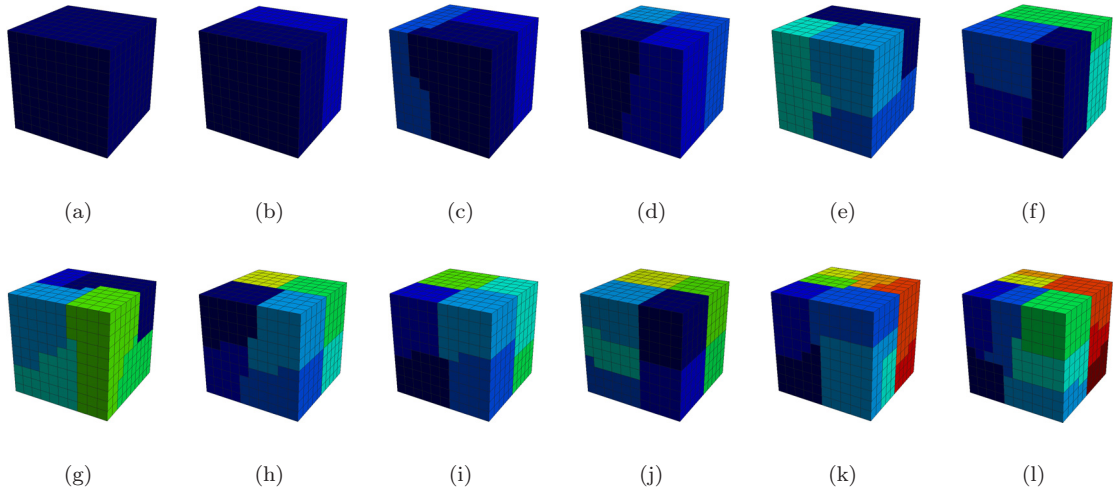


Figura 10.26: Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, de 1 a 12 processadores, para os problemas microestruturais (locais).

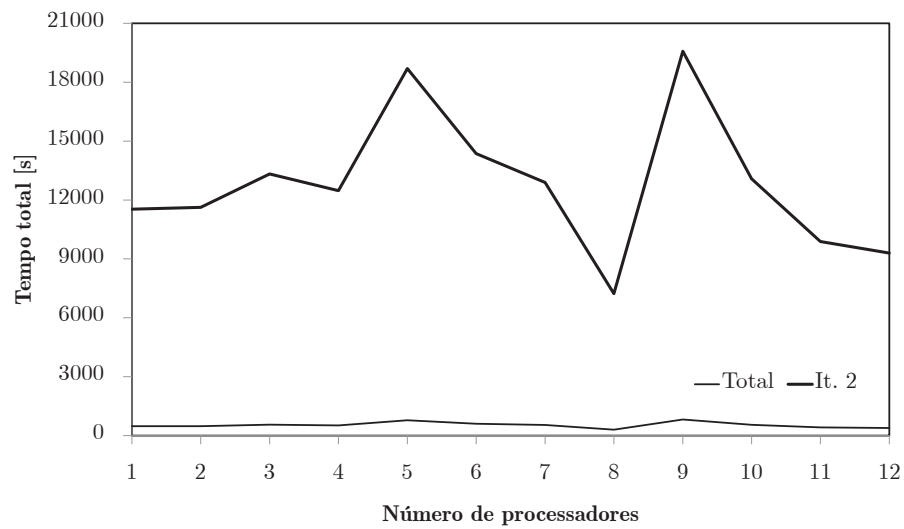


Figura 10.27: Variação do tempo total (Total) e de execução da segunda iteração (It.2) da resolução do problema de otimização hierárquica em função do número de processadores,  $n_p$ .

um dos problemas locais. Os valores de *speed-up* obtidos na resolução dos sistemas de equações de cada um dos correctores, apresentados na figura 10.28, mostram oscilações que são coerentes com as que foram obtidas para o problema global (*cf.* Fig. 10.27). Analisando as eficiências

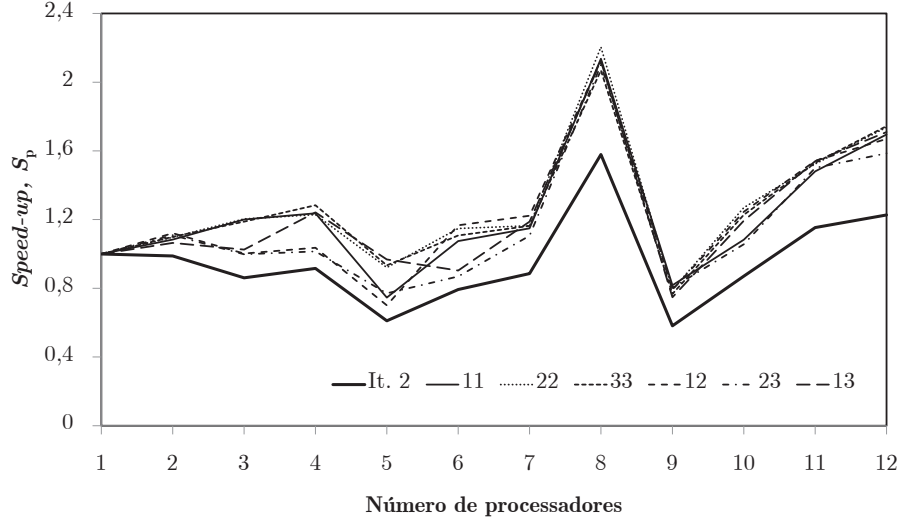


Figura 10.28: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , das resoluções de sistema associadas a uma CRU, no problema de otimização hierárquica, com o número de processadores,  $n_p$ .

correspondentes (*vd.* Fig. 10.29), observa-se novamente o mau desempenho paralelo. Verifica-se também que a tendência geral dos vários sistemas de equações é coerente com a tendência do problema global. Analisando, por exemplo, os resíduos relativos da resolução do sistema de equações do corrector  $\chi_{11}$  para diferentes números de processadores (*vd.* Fig. 10.30), constata-se que, mesmo na segunda iteração, onde as diferenças de propriedades ainda são reduzidas (razão pela qual a resolução em série é estável), as instabilidades do algoritmo de resolução em paralelo são notórias. Ao longo das diferentes iterações e para diferentes problemas locais, mantém-se esta tendência. Verifica-se também que os problemas de condicionamento destes problemas são generalizados nesta implementação. Apesar do preconditionador utilizado melhorar significativamente o condicionamento, a factorização é feita sem que as penalidades sejam correctamente distribuídas, continuando a induzir instabilidades. Em conjunto com as variações de rigidez associadas à optimização topológica, estas instabilidades são associadas maioritariamente às penalidades das condições de periodicidade, idênticas em todas as CRU. O principal problema neste caso surge na relação entre estas penalidades e a decomposição de domínio, razão pela qual a tendência geral de desempenho se mantém ao longo das diferentes iterações. Como a decomposição do sistema de equações é efectuada elemento a elemento (*vd.* Sec. 7.7.3), as penalidades utilizadas na imposição de condições de fronteira MFC encontram-se muitas vezes descompensadas em processadores distintos. Tal leva a que haja uma propensão inicial para a resolução seguir uma tendência distinta da solução pretendida, correspondente ao desequilíbrio entre regiões isoladas dos subsistemas que apenas serão equilibradas à medida que o processo iterativo de resolução ocorre e as soluções nos graus de liberdade de fronteira são partilhados entre processadores (*vd.* Fig. 7.16(b)). Isto reflecte-se de forma distinta, de acordo com a decomposição de domínio, dependendo da malha e do número de processadores. Para ilustrar este problema, na figura 10.31 mostram-se os resíduos relativos da resolução de um sistema de equações correspondente ao corrector  $\chi_{12}$  de um problema genérico bidimensional. Esta resolução é feita com 1 e 2 processadores, em condições normais de periodicidade, e, alternativamente, com as MFC desligadas, ou seja, com solicitações do problema de homogeneização correspondente, mas apenas fixação dos vértices. É possível verificar aqui dois



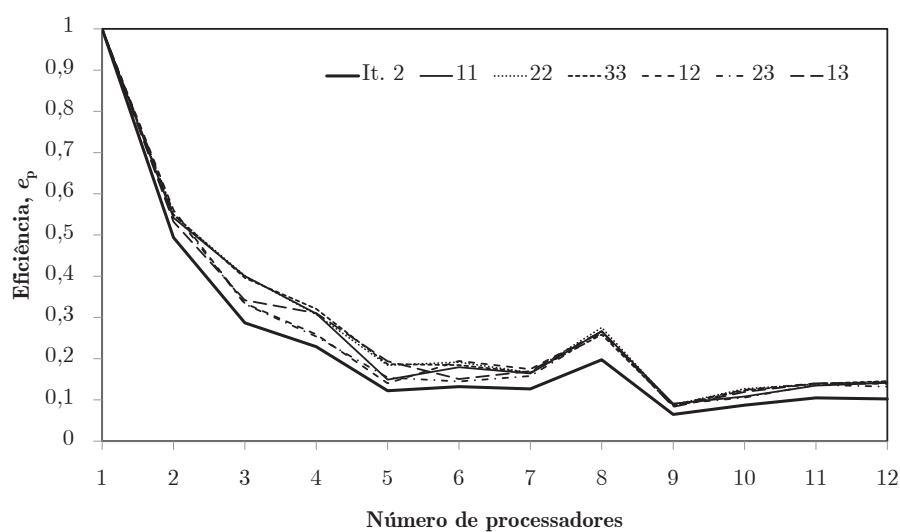


Figura 10.29: Evolução da eficiência,  $e_p$ , das resoluções de sistema associadas a uma CRU, no problema de optimização hierárquica, com o número de processadores,  $n_p$ .

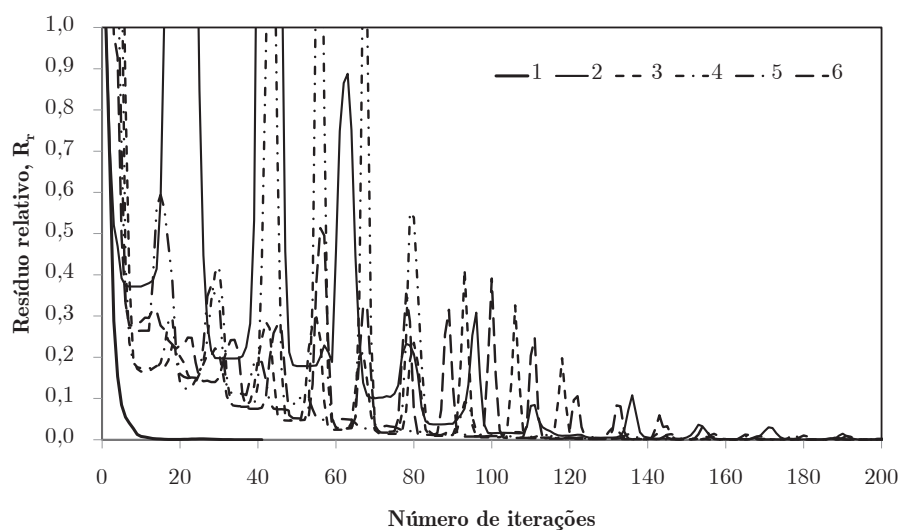


Figura 10.30: Resíduos relativos da resolução do sistema de equações do corrector  $\chi_{11}$  associada a uma CRU 3-D, no problema de optimização hierárquica, para diferentes números de processadores,  $n_p$ .

efeitos. A imposição de condições de fronteira MFC, utilizando um método de penalidade, desestabiliza a resolução do sistema de equações em qualquer um dos casos. Adicionalmente, enquanto a resolução em paralelo se aproxima da resolução em série quando não existem MFC e a resolução em série com MFC converge ainda assim para a solução num número de iterações aproximado, a resolução em paralelo do problema com MFC apresenta instabilidades iniciais de tal ordem que o processo leva muito mais iterações para atingir a convergência.

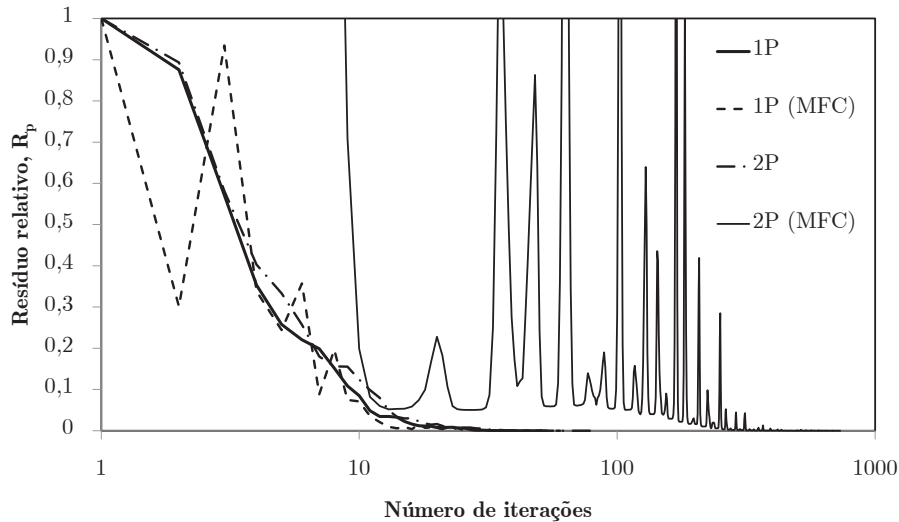


Figura 10.31: Resíduos relativos de uma resolução de sistema associada a uma CRU 2-D, num problema HEA, para diferentes números de processadores,  $n_p$ , sem e com condições de fronteira MFC.

Nas figuras 10.32 é possível observar o reflexo deste fenómeno na solução. A figura 10.32(a) mostra as solicitações correspondentes ao corrector  $\chi_{12}$ , e as seguintes mostram a solução da primeira iteração do método do gradiente conjugado preconditionado para 1, 2 e 3 processadores. Por um lado verifica-se que, nos casos paralelos, o comportamento em termos de MFC é o esperado apenas em regiões que pertencem ao mesmo processador. Por outro lado, o facto de cada processador ter acesso apenas às penalidades das MFC que se encontram no seu próprio domínio leva a que as penalidades correspondentes sejam inicialmente processadas como meras prescrições de deslocamento nulo. Esta questão é um problema também em termos de técnica de decomposição de domínio e de preconditionamento. O processamento de domínios no programa PARCONG é feito com recurso ao método aditivo de Schwarz [Smith *et al.* 1996, Saad 2003]. Neste método, em iterações semelhantes às iterações block-Jacobi, são resolvidos blocos associados a cada subdomínio separadamente e actualizando cada subdomínio com a influência dos resíduos globais. Em cada iteração, no entanto, o bloco associado a cada domínio é resolvido independentemente e as influências dos domínios vizinhos apenas são contabilizadas, através do resíduo, no final de cada iteração em todos os domínios. O preconditionamento, por sua vez, é feito sobre cada bloco de forma completamente independente. Assim, para além do facto das condições de fronteira de periodicidade tornarem os sistemas anormalmente esparsos, levam a que os blocos associados aos domínios tendam gerar a resolução de subproblemas locais que se afastam inicialmente de uma influência muito vincada dos subproblemas vizinhos.

Atendendo a estes problemas, fruto do método utilizado para impor as condições de periodicidade, da forma como as penalidades são geridas no algoritmo de resolução e das estratégias de decomposição de domínio utilizadas, a secção seguinte aborda uma alternativa de resolução em paralelo destes problemas.

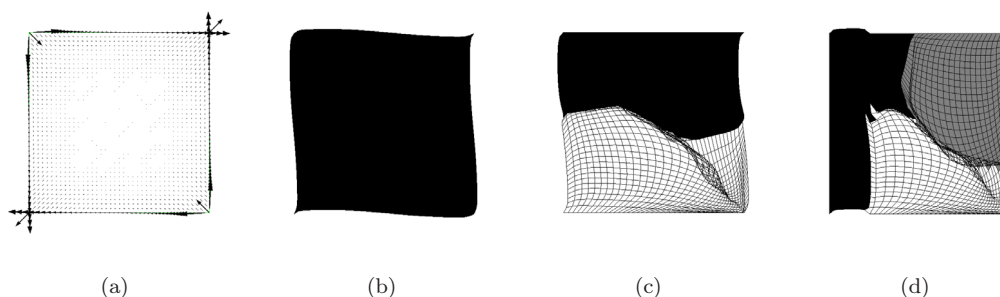


Figura 10.32: Análise do modo próprio de deformação  $xy$  de um problema de HEA com uma CRU 2-D: (a) vectores de solicitação e deformada no final da primeira iteração do método do gradiente conjugado executado em (b) 1, (c) 2 e (d) 3 processadores.

## 10.4.2 Cálculo Distribuído

Atendendo ao exposto anteriormente, discute-se aqui o recurso à distribuição dos problemas locais como procedimento para a obtenção de melhores resultados em termos de desempenho paralelo. Refira-se que esta solução, mesmo num caso de divisão equitativa de problemas entre processadores, depende sempre do balanceamento de cada um dos problemas, como se ilustra na figura 10.33. Assim, o desempenho paralelo é sempre limitado pelo processador que consome mais tempo de processamento.

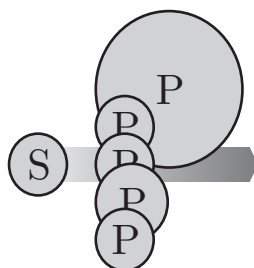


Figura 10.33: Ilustração do impacto de um processo de cálculo distribuído com balanceamento heterogéneo, com a execução de tarefas em série (S) e em paralelo (P), no desempenho de um sistema homogéneo de computação.

Resolve-se novamente o mesmo problema. Neste caso, a decomposição de domínio é feita apenas na macroescala, conforme ilustrado na figura 10.25. Em cada caso, os problemas locais são resolvidos de forma independente no processador correspondente ao domínio do elemento a que pertence. Tomando como exemplo o caso de utilização de 10 processadores, esta distribuição de problemas resulta no que se ilustra na figura 10.34. Assim, o problema macroestrutural é resolvido em paralelo, com todos os processadores em simultâneo, enquanto que os problemas locais são resolvidos de forma independente pelos respectivos processadores.

Na abordagem da secção anterior, o tipo de estrutura hierárquica utilizada na resolução do problema era indiferente. Nesta, opta-se por mostrar a resolução do problema com duas estratégias, H1 e H3 (*vd.* Sec. 7.5). Observa-se ao desta secção que o desempenho segundo estas estratégias é idêntico. Apesar da estratégia H1 não permitir a separação completa dos problemas, a homogeneização é de tal forma dominante em termos de processamento que o desempenho paralelo leva aos mesmos resultados. Na figura 10.35 verifica-se que as curvas correspondentes aos tempos de

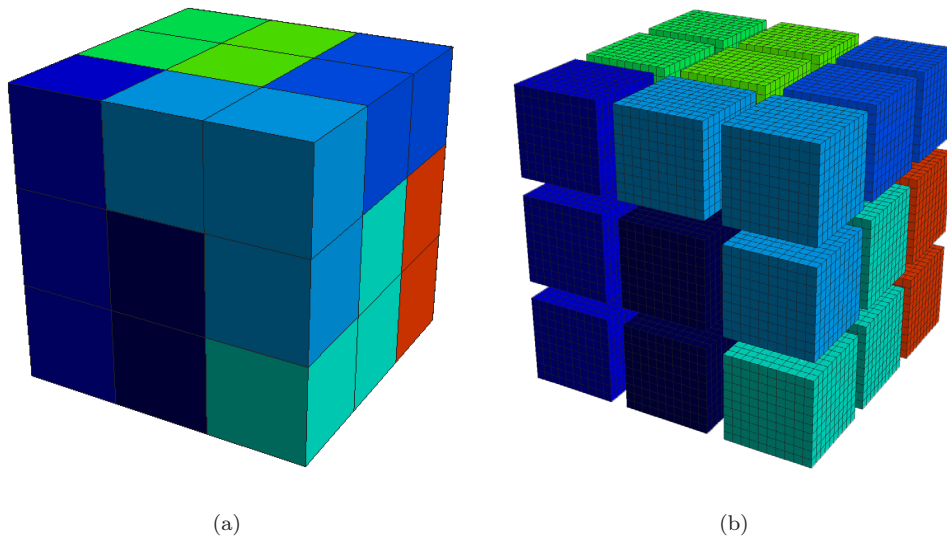


Figura 10.34: Isovalores correspondentes ao número do processador que a cada subdomínio é alocado, no caso de 10 processadores: (a) decomposição do problema global e (b) distribuição dos problemas locais.

execução são praticamente coincidentes. Utiliza-se também, mais uma vez, a segunda iteração como elemento de análise.

Na figura 10.36 mostram-se os respectivos valores de *speed-up*. Pode ver-se aqui que as diferentes estratégias conduzem sensivelmente aos mesmos desempenhos. Constata-se também que o desempenho global segue a mesma tendência que cada uma das iterações. Estas afirmações são igualmente válidas na análise da eficiência do processamento paralelo, como se ilustra na figura 10.37. Refira-se que, apesar de se esbater no tempo total, a primeira iteração destes problemas prejudica sempre o desempenho global. Nesta estratégia distribuída, o balanceamento da primeira iteração é completamente heterogéneo já que apenas se resolve um único problema local. Isto deve-se ao facto da distribuição de material inicial ser a mesma para todas as CRU, tornando desnecessária a resolução dos restantes problemas locais.

Nos gráficos correspondentes aos indicadores de desempenho anteriores, para além de linhas representativas dos desempenhos lineares ideais, são ainda ilustradas linhas indicadoras adicionais. Estas correspondem ao desempenho máximo do problema em análise para cada uma das distribuições possíveis de problemas pelo número de processadores. Na realidade, o desempenho apenas pode ser o ideal em casos em que se obtenha um resto nulo da divisão inteira do número de problemas locais pelo número de processadores. No caso em análise, isto apenas acontece para 1, 3 e 9 processadores. Mostram-se na figura 10.38 outros exemplos de desempenho máximo do cálculo distribuído para problemas com 27, 50 e 64 elementos finitos macroestruturais. Note-se que, fora dos casos ideais, o balanceamento dos requisitos de processamento entre processadores é heterogéneo, pelo que, em condições normais, num sistema homogéneo como aqui se utiliza, os processadores com domínios mais pequenos tenham geralmente de esperar pela conclusão das tarefas dos mais sobrecarregados. Quanto maior o número de elementos finitos do problema macroestrutural, ou seja, quanto maior for o número de problemas locais, menores serão as diferenças em termos de balanceamento. Note-se ainda que, mesmo entre processadores com um número idêntico de problemas locais, o tempo de resolução de cada um dos problemas associados tende a variar, com o desempenho a ser condicionado pelo pior caso.

Se as eficiências forem calculadas em função dos valores máximos de *speed-up* em vez dos

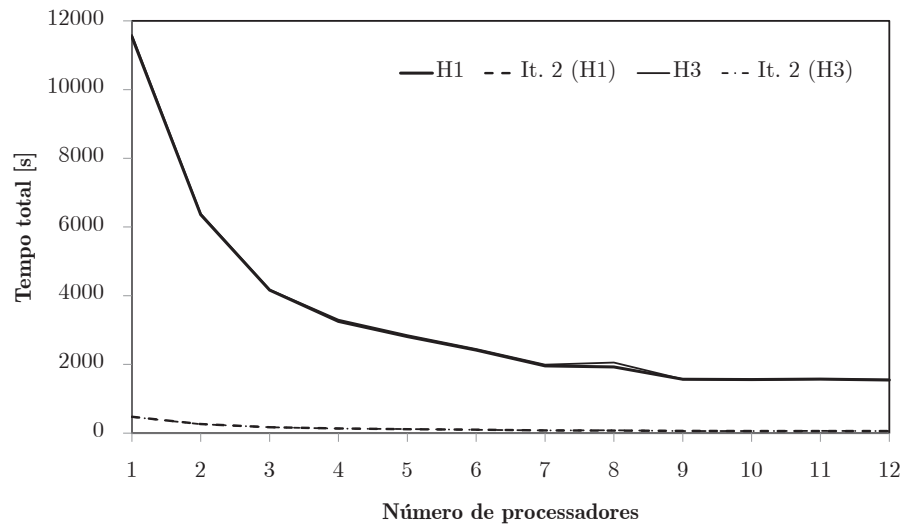


Figura 10.35: Variação do tempo total de resolução do problema de otimização hierárquica, versão distribuída, em função do número de processadores,  $n_p$ .

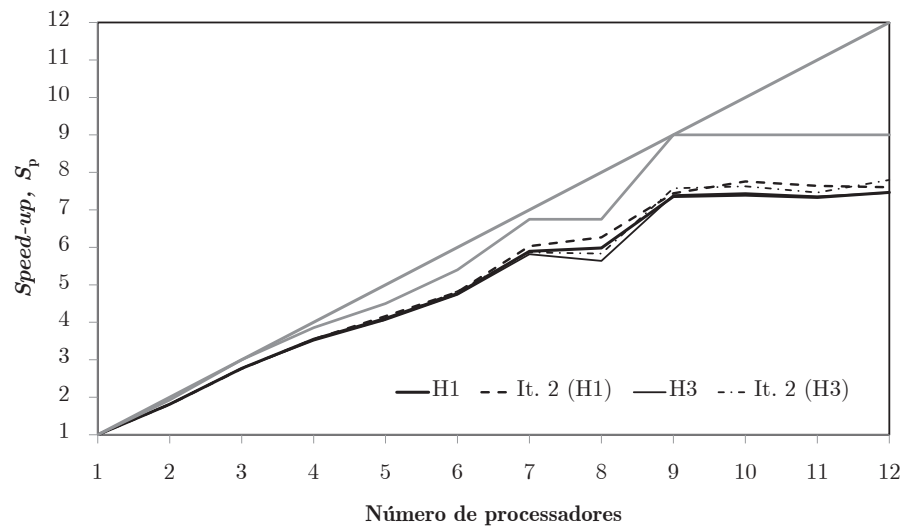


Figura 10.36: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , da versão distribuída de um problema de otimização topológica hierárquica com o número de processadores,  $n_p$ .

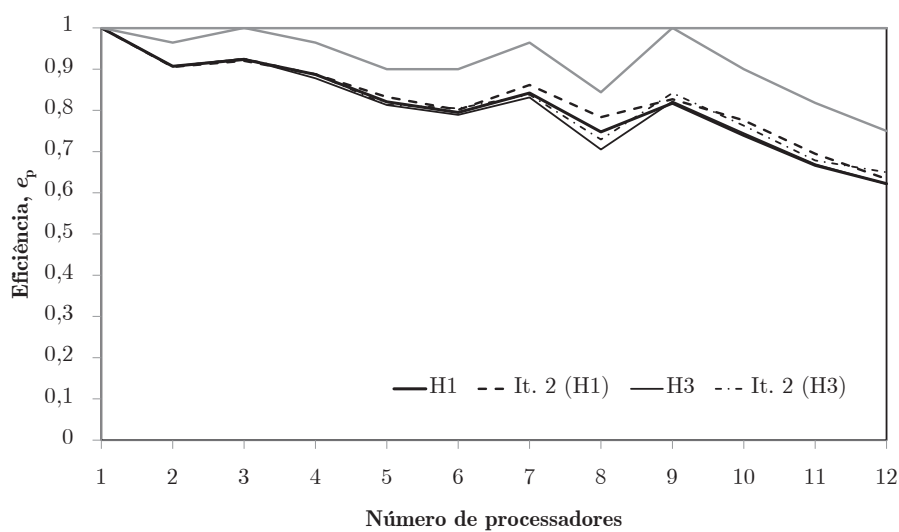


Figura 10.37: Evolução da eficiência,  $e_p$ , da versão distribuída de um problema de otimização topológica hierárquica com o número de processadores,  $n_p$ .

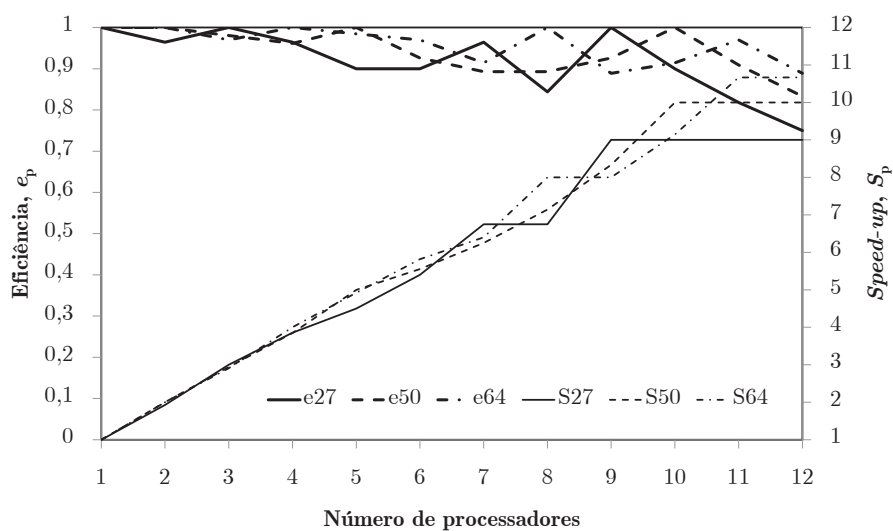


Figura 10.38: Representação da evolução dos limites máximos de *speed-up*,  $S_p$ , e eficiência,  $e_p$ , no cálculo distribuído em sistemas de computação homogêneos com o número de processadores,  $n_p$ .

efectivos, as eficiências corrigidas correspondentes seriam as que se mostram na 10.39. Estas eficiências podem calcular-se como  $e'_p = e_p n_p / S'_p$ . O *speed-up* máximo pode calcular-se como  $S'_p = n_h / d_h$ , onde  $n_h$  designa o número de problemas locais e  $d_h$  o inteiro que resulta da divisão inteira do número de problemas pelo número de processadores. Verifica-se, assim, que o desempenho efectivamente obtido, face ao máximo possível, é superior ao apresentado inicialmente e com uma tendência mais regular.

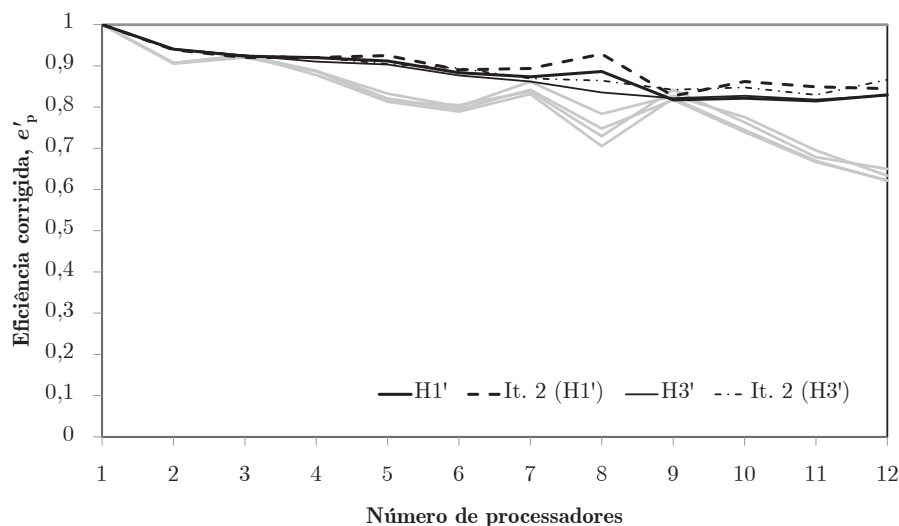


Figura 10.39: Representação da evolução das eficiências corrigidas,  $e'_p$ , no cálculo distribuído em sistemas de computação homogênea com o número de processadores,  $n_p$ .

Uma clara limitação da implementação aqui testada corresponde às comunicações efectuadas em cada iteração. Com o facto de se concentrarem algumas operações de optimização no nó mestre, para além da concentração de informação para controlo e pós-processamento, a quantidade de informação trocada entre processadores relativa aos problemas locais origina um *bottleneck* de desempenho. Na figura 10.40 comparam-se os tempos de execução da segunda iteração do problema analisado com o tempo despendido em comunicações. Comparam-se ainda estes tempos com os tempos obtidos sem comunicações (H1" e H3") obtidos por subtracção dos anteriores. Apesar de, em absoluto, a penalização associada à elevada quantidade de comunicações não ser muito elevada, verifica-se que sem esta os indicadores de desempenho subiriam para valores próximos dos óptimos, como se pode ver na figuras 10.41 e 10.42. Salienta-se o facto de parte da comunicação ser feita não por necessidade de processamento mas por opção de implementação, nomeadamente por questões de controlo de processo e pós-processamento, ou pela estrutura modular do programa desenvolvido. Além disso, parte dos resultados locais são escritos em ficheiros relativos a cada um dos problemas locais directamente pelos processadores em causa. Nestes casos, a escrita é feita no disco rígido do nó mestre. Note-se que estes resultados são beneficiados pelo facto de o tempo perdido em comunicações na primeira iteração ser 0. Ainda assim, é possível perceber que esta é a grande limitação neste processo. Este factor é particularmente visível em casos de pequeno grão. Na figura 10.43 mostram-se as malhas de um problema ilustrativo macroestrutural 2-D e dos problemas microestruturais associados. A malha da microestrutura é constituída por 400 elementos quadriláteros lineares. Neste caso, os problemas de comunicação tornam-se dominantes, para além de o facto dos problemas locais serem de grão pequeno e conduzirem a muita dispersão em termos de tempos de resolução, prejudicando assim o desempenho global.

Na figura 10.44 mostram-se os tempos de execução de uma iteração dos problemas locais resolvidos com a estratégia de optimização menos favorável em termos de cálculo paralelo (H1). Note-se

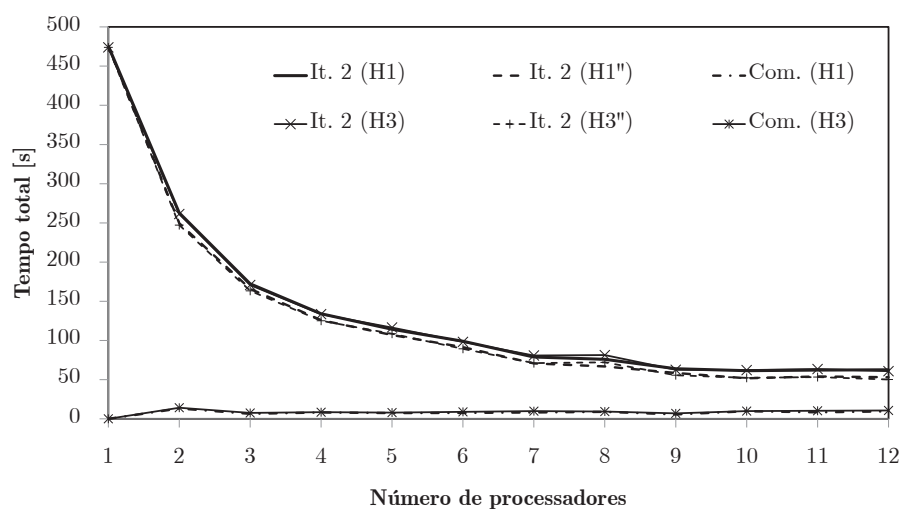


Figura 10.40: Influência das comunicações na variação do tempo total de resolução do problema de otimização hierárquica, em função do número de processadores,  $n_p$ .

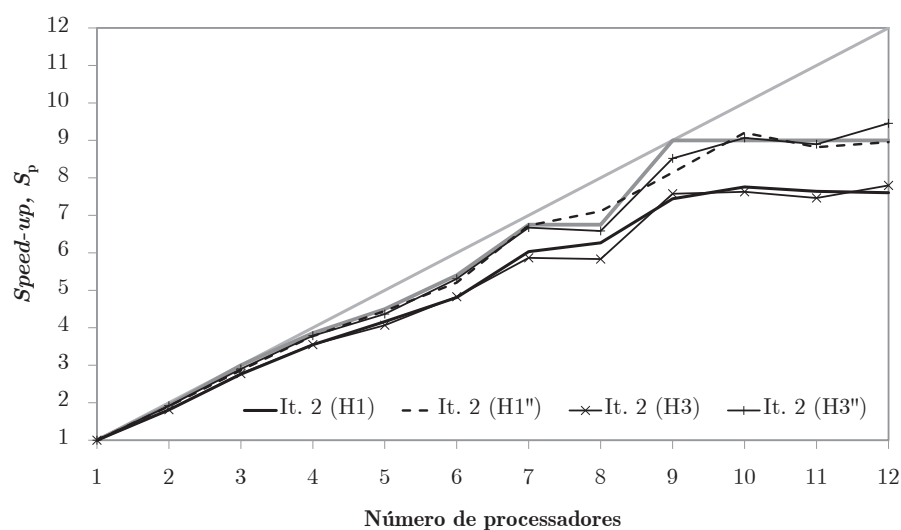


Figura 10.41: Evolução do *speed-up*,  $S_p$ , em função do número de processadores,  $n_p$ , com a influência das comunicações.



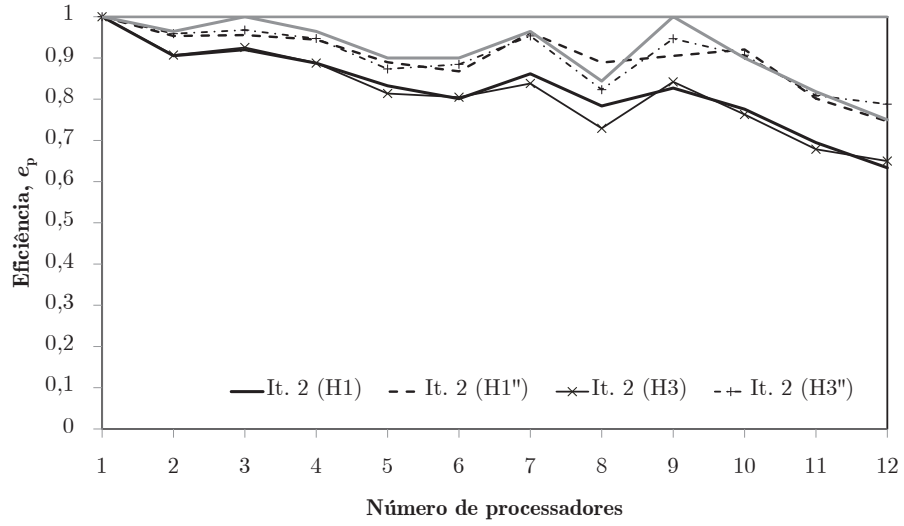


Figura 10.42: Evolução da eficiência,  $e_p$ , em função do número de processadores,  $n_p$ , com a influência das comunicações.

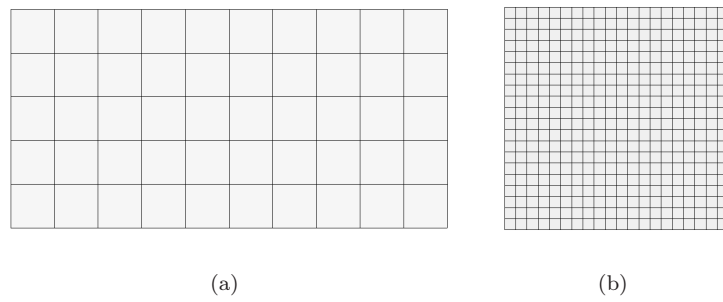


Figura 10.43: Malhas de elementos finitos utilizadas num problema de otimização multiescala 2-D: (a) problema global e (b) problemas locais.

que os tempos de resolução são muito reduzidos. Uma iteração em série corresponde à resolução, em 15 s, num só processador e para além das restantes tarefas, de  $5 \times 10$  ( $n_E$ ) problemas locais, cada um com 3 sistemas de equações de 882 graus de liberdade.

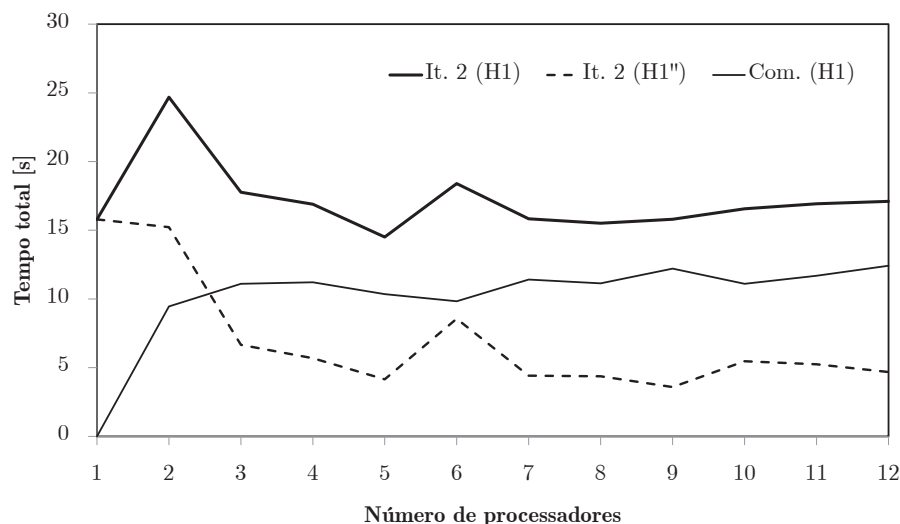


Figura 10.44: Variação do tempo de resolução na segunda iteração de um problema de optimização hierárquica 2-D de grão reduzido, em função do número de processadores,  $n_p$ .

Neste caso, o peso relativo das tarefas de comunicação é muito mais elevado. Com o peso da comunicação, o cálculo paralelo não traz nenhum benefício na resolução deste problema. Verifica-se, contudo, que sem as comunicações estes benefícios seriam já aceitáveis (*vd.* Fig. 10.45). No entanto, com problemas de grão reduzido, observa-se também que o maior impacto da dispersão dos tempos de resolução dos sistemas locais prejudica o desempenho paralelo. Ainda assim, nestes casos, seria mais justificável alterar a estrutura de cálculo para aumentar a independência dos problemas locais e reduzir as comunicações.

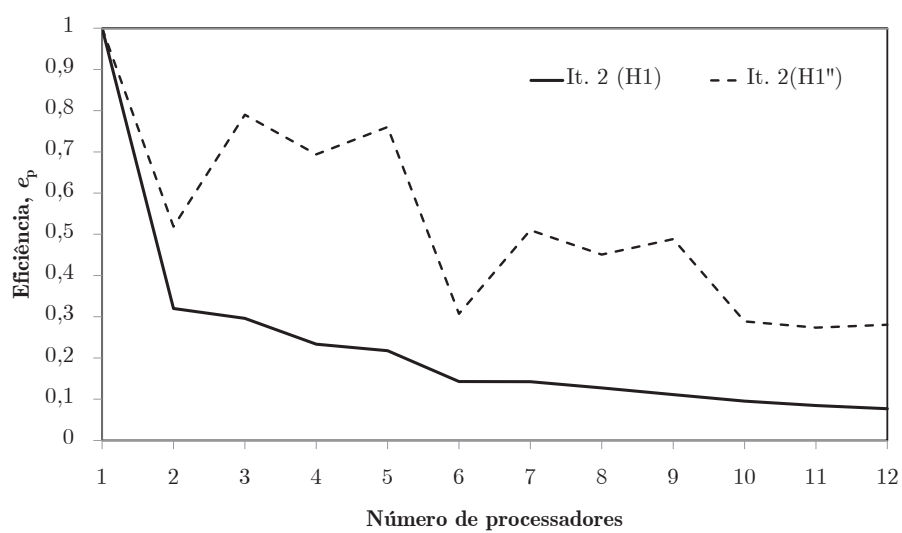


Figura 10.45: Evolução da eficiência,  $e_p$ , da segunda iteração de um problema de otimização hierárquica 2-D de grão reduzido, em função do número de processadores,  $n_p$ .

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

# Capítulo 11

## Aplicações Gerais

*Discutem-se estratégias de processamento com o programa mainFRAN. Apresentam-se exemplos gerais de aplicação e analisam-se os resultados de metodologias alternativas em optimização multiescala.*

---

### 11.1 Introdução

Neste capítulo abordam-se algumas aplicações alternativas no contexto das metodologias desenvolvidas. Apresentam-se exemplos de resolução multiobjectivo de problemas de optimização topológica hierárquica, em primeiro lugar na sua vertente multicarregamento e posteriormente na conjugação de problemas mecânicos com problemas térmicos. Adicionalmente, ilustram-se modos de processamento multiescala alternativos. Estas estratégias visam uma maior adequação a aplicações com materiais compósitos e celulares. Pretende-se promover uma melhor aproximação a estruturas e materiais efectivamente fabricáveis, ponto onde a abordagem geral de optimização topológica hierárquica se torna limitativa.

### 11.2 Optimização Multiescala Multiobjectivo

Na presente secção abordam-se problemas de optimização multiescala multicarregamento e multiobjectivo. Os problemas apresentados são 2-D e utilizam-se elementos quadráticos quadriláteros de 8 nós na macroescala. Como referido anteriormente, não representam custos significativos ao ser utilizados na macroescala de um problema de optimização topológica hierárquica e minimizam a existência de efeitos numéricos de instabilidade do tipo *checkerboard*. Utilizou-se uma estratégia H1 com o Método das Assíptotas Móveis (MMA) na resolução destes problemas, com actualização do parâmetro  $s_0$  de controlo da actualização de variáveis. A malha utilizada nos problemas locais é constituída por  $30 \times 30$  elementos quadriláteros lineares. Utilizou-se o SIMP com uma penalização  $p = 4$  e  $d_m = 0,0001$ . Esta opção deve-se ao facto de o SIMP convencional dar origem a diferenças demasiado elevadas nas propriedades locais, resultando frequentemente em sérios problemas de condicionamento e convergência em problemas locais dominados por objectivos complementares.

Em termos de carregamentos múltiplos, retoma-se o problema apresentado na Secção 9.3.3, com uma malha correspondente ao caso MH2 ( $10 \times 30$  elementos) apresentado na figura 9.121

mas utilizando elementos quadráticos de 8 nós. Os casos de multicarga aqui resolvidos envolvem a ponderação de apenas o primeiro e o terceiro carregamentos (*cf.* Fig. 9.66). Apresentam-se na figura 11.1 as evoluções das funções-objectivo obtidas na resolução deste problema, para pesos do terceiro carregamento de  $w_3 = 0,0$ ,  $w_3 = 0,2$ ,  $w_3 = 0,5$ ,  $w_3 = 0,8$  e  $w_3 = 1,0$ . A comparação entre os dois objectivos é semelhante ao obtido anteriormente para o caso de uma escala apenas (*vd.* Fig. 9.70), com o segundo carregamento a corresponder a uma redução maior da energia de deformação. No entanto, as variações mostram-se neste caso mais progressivas e estáveis, fruto da actuação ao nível da microescala e da progressiva influência constitutiva sobre o material em cada ponto da macroescala. Este tipo de actualização origina também, apesar de uma discretização macroestrutural bastante menos detalhada, uma minimização mais eficaz graças ao elevado detalhe local dado pela microescala. Este detalhe é ilustrado na figura 11.2, onde se podem observar as topologias obtidas na resolução destes problemas. Verifica-se uma tendência global ao nível da topologia semelhante ao observado nos problemas estritamente macroestruturais. Tal como esperado, verifica-se também que a evolução das topologias microestruturais fornece um nível de detalhe que permite a obtenção de uma resposta global muito melhor do que a discretização macroestrutural poderia permitir. Atentando aos exemplos de topologias locais, observam-se diversos efeitos. É perceptível a evolução das microestruturas no sentido de corresponder à melhor resposta local de acordo com a solicitação global. Este facto é bastante evidente, por exemplo, nos diversos laminados unidireccionais apresentados. Observa-se também em vários casos uma tendência para que as transições entre microestruturas sejam graduais, com topologias vizinhas a evoluir de forma muitas vezes progressiva. Isto permite concluir que um maior detalhe macroestrutural dará origem a uma resposta ainda melhor, apesar de se verificar que por pouca margem, com uma variação que no limite seria contínua entre topologias e propriedades de CRU vizinhas.

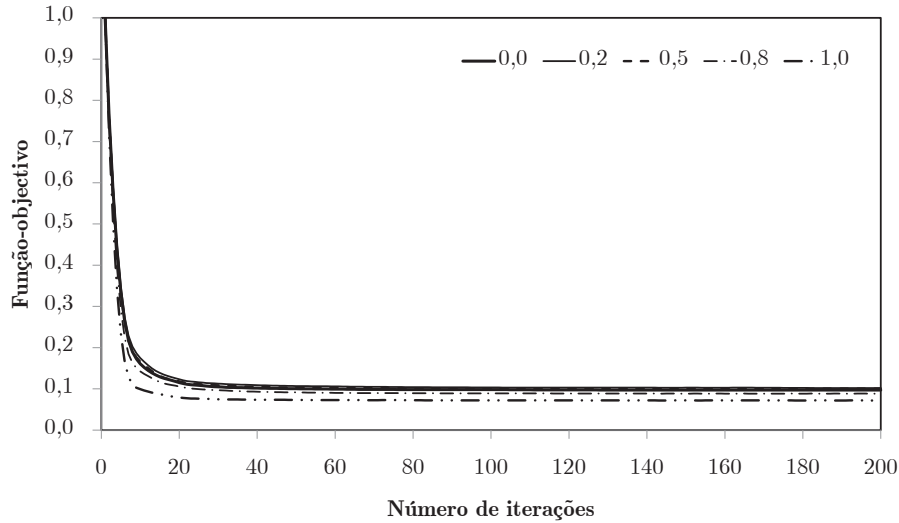


Figura 11.1: Evolução das funções-objectivo na resolução de problemas de optimização topológica hierárquica multicarregamento, com um peso do terceiro carregamento  $w_3 = 0,0$ ,  $w_3 = 0,2$ ,  $w_3 = 0,5$ ,  $w_3 = 0,8$  e  $w_3 = 1,0$ .

As questões referidas aplicam-se também se se considerarem objectivos de naturezas diferentes. Considere-se o exemplo típico de roda da bicicleta de Michell [Haber *et al.* 1996, Bendsøe e Sigmund 2003, Rozvany 2009, Coelho 2009], utilizando as condições de fronteira apresentadas na figura 11.3(a). A este problema acrescenta-se um objectivo térmico segundo duas configurações alternativas, apresentadas esquematicamente nas figuras 11.3(b) e (c). Em qualquer um dos casos considera-se uma fonte fria de temperatura prescrita e a imposição de fluxos superficiais de calor

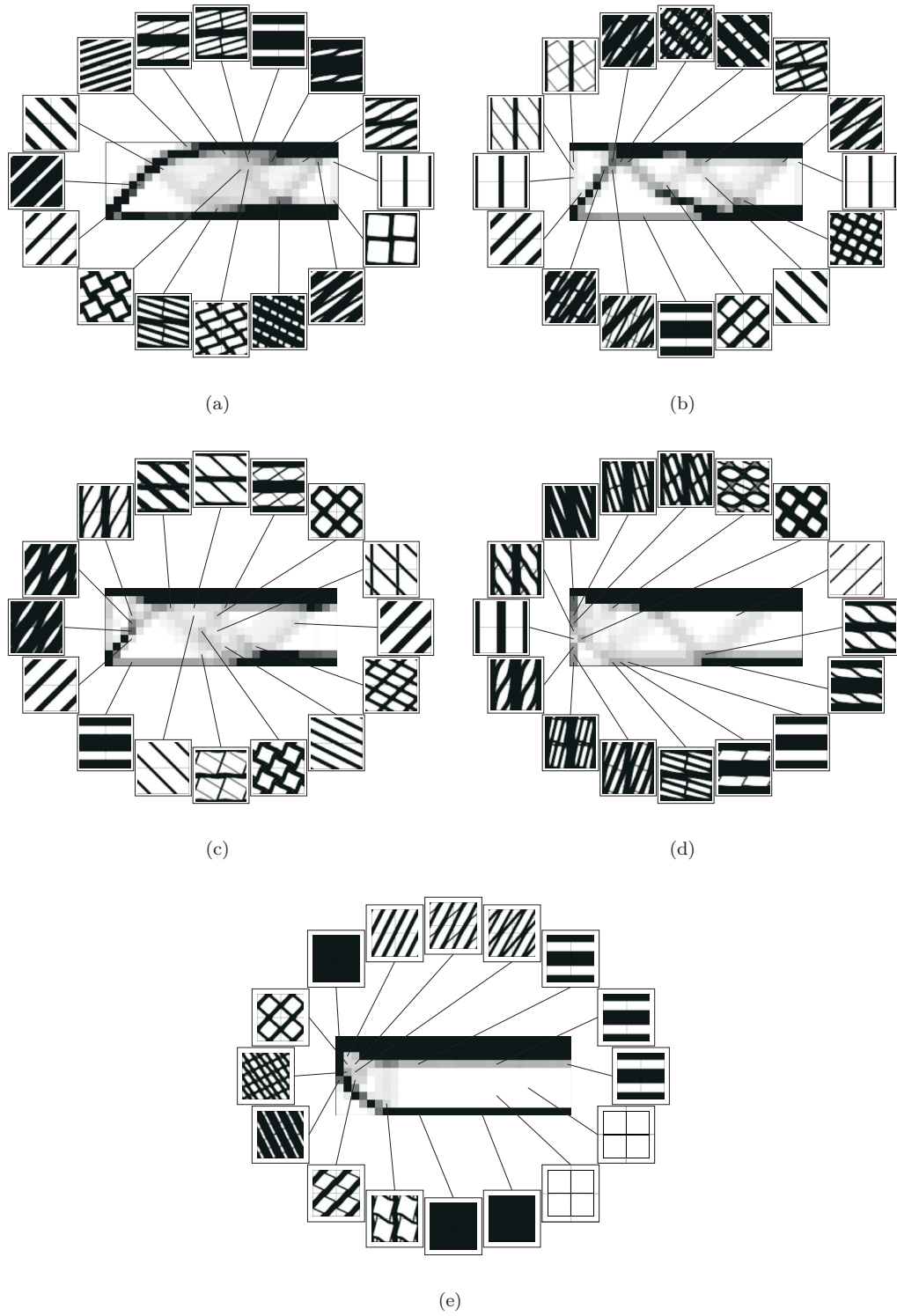


Figura 11.2: Topologias obtidas na aplicaão multicarregamento de um problema de otimizaão topol3gica hier3rquica, com um peso do terceiro carregamento (a)  $w_3 = 0,0$ , (b)  $w_3 = 0,2$ , (c)  $w_3 = 0,5$ , (d)  $w_3 = 0,8$  e (e)  $w_3 = 1,0$ .

como fonte quente, na fronteira exterior e em todo o dom nio, respectivamente. A malha utilizada nestes casos   de  $25 \times 25$  elementos quadril teros quadr ticos de 8 n s. Resolveram-se problemas considerando um peso do objectivo t rmico de  $w_t = 0,0$ ,  $w_t = 0,2$ ,  $w_t = 0,5$ ,  $w_t = 0,8$  e  $w_t = 1,0$ . Nas figuras 11.4 podem ver-se os valores obtidos para as fun  es-objectivo global, mec nica e t rmica para cada uma das configura  es apresentadas, de acordo com as pondera  es multiobjectivo referidas. A evolu  o de cada um dos objectivos nas diferentes configura  es pode ser visualizada na figura 11.5 e curvas de Pareto s o apresentadas na figura 11.6. Em todos os casos verifica-se que os objectivos s o concorrentes, tendendo a minimiza  o de um a prejudicar de forma acentuada a minimiza  o do outro. Esse efeito   percept vel na representa  o geral de fun  es-objectivo e de curvas de Pareto, mas talvez mais evidente nas representa  es das evolu  es de cada uma das fun  es-objectivo ao longo do processo iterativo. Observa-se nestes casos uma clara deteriora  o da resposta nos objectivos complementares quando se optimiza preferencialmente um dos problemas. Em contrapartida, constata-se que para pondera  es interm dias as respostas se tornam bastante equilibradas em todos os casos. Isto deve-se   distribui  o das condi   es de fronteira dos problemas utilizados e ao detalhe fornecido pela optimiza  o multiescala.

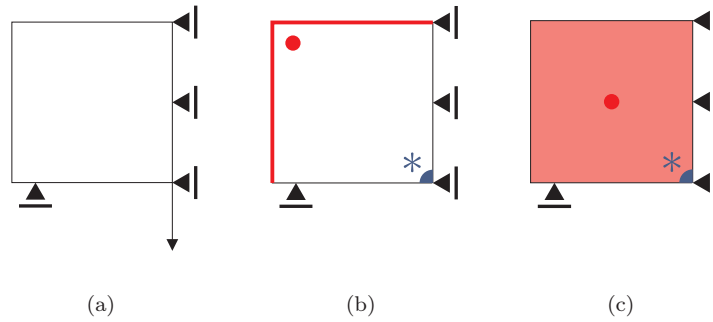
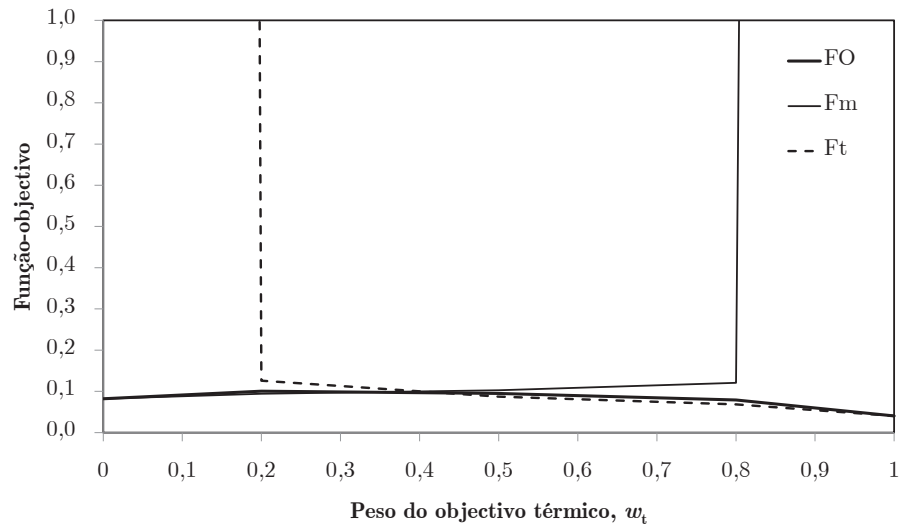


Figura 11.3: Defini  o das configura   es de um problema de roda de bicicleta com pondera  o multiobjectivo: (a) problema mec nico, (b) configura   o 1 e (c) configura   o 2 do problema t rmico (\* – fonte fria,   – fonte quente).

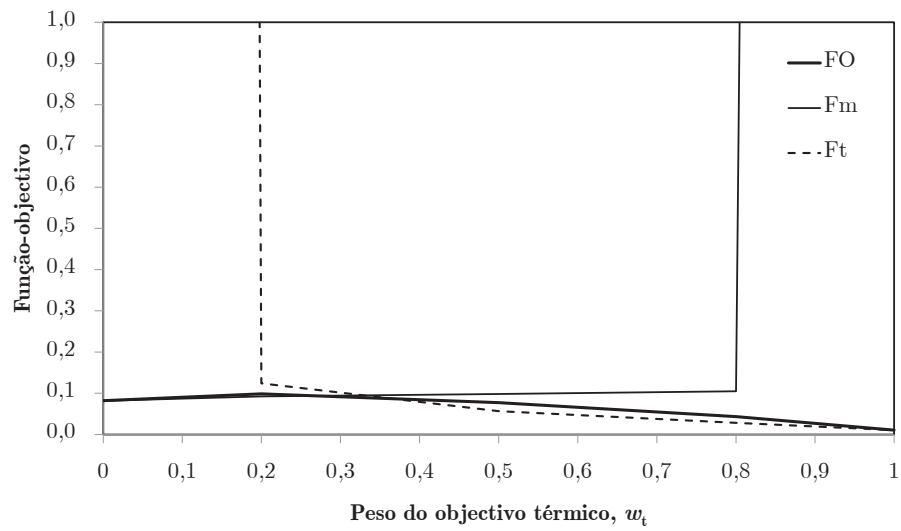
O detalhe obtido ao n vel das topologias  ptimas   ilustrado nas figuras seguintes. A figura 11.7 ilustra a topologia obtida para o problema estritamente mec nico ( $w_t = 0,0$ ), comum a ambas as configura   es. Nas figuras 11.8 e 11.9 representam-se as topologias obtidas para as duas configura   es t rmicas apresentadas, de acordo com o peso do objectivo t rmico na pondera  o multiobjectivo. Apesar dos problemas locais serem independentes,   percept vel a progressividade das topologias, conduzindo a varia   es graduais de propriedades coerentes com o detalhe microestrutural necess rio   resposta. Isto   particularmente evidente nos casos de pondera  o exclusivamente t rmica ( $w_t = 1,0$ ), onde as topologias locais obtidas evoluem gradualmente entre as orienta   es limite (horizontal e vertical) ideais para a condu   o de calor por condu   o entre as fontes impostas.   semelhan a do verificado na Sec   o 9.4 (*e.g.* Fig. 9.112), verifica-se que a utiliza   o de t cnicas de filtragem de sensibilidades mant m a generalidade das topologias locais relativamente simples, permitindo at  que sejam aproximadas por combina   es de constituintes sob a forma de laminados. No entanto, a influ  ncia dos diferentes objectivos tende a aumentar a sua complexidade em diversos casos, especialmente em regi   es de transi   o entre topologias locais mais definidas.   poss vel constatar a coer  ncia das orienta   es das fases locais com os problemas envolvidos e as regi   es a que dizem respeito. Nota-se ainda o aparecimento de ondula   es em diversas fases por influ  ncia do problema t rmico, possivelmente por uma quest  o de aumento da  rea de interface entre fases para aumentar a dissipa   o de calor.

Refira-se ainda que a resolu   o dos problemas apresentados se mostrou muito est vel, em grande medida gra  as   estabiliza   o progressiva das ass mptotas m veis do m todo MMA. Na sua vers  o



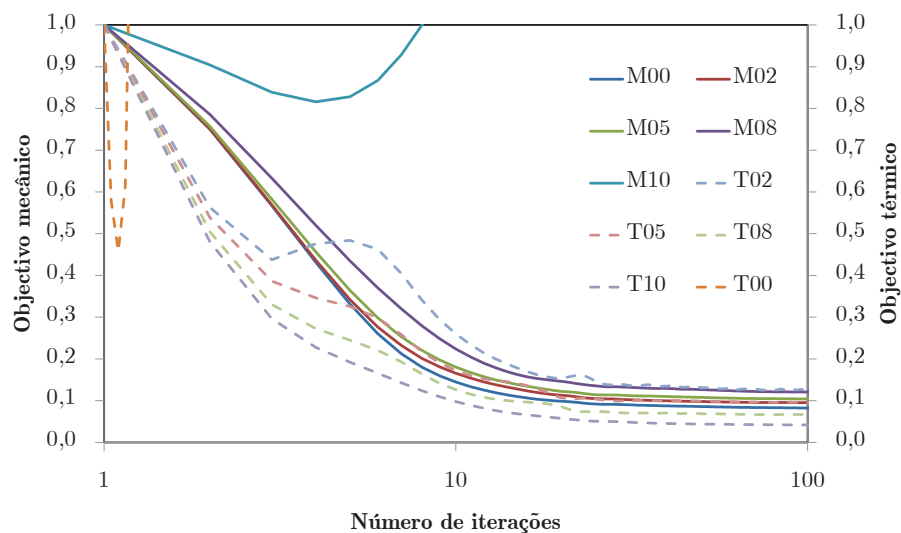


(a)

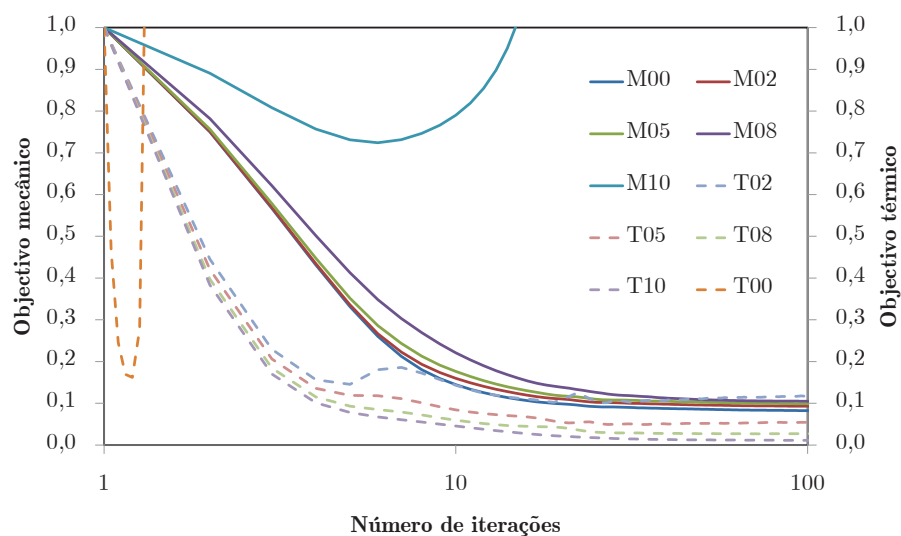


(b)

Figura 11.4: Valores óptimos das funções-objetivo na resolução de problemas de otimização topológica hierárquica multiobjective, com um peso do problema térmico  $w_t = 0,0$ ,  $w_t = 0,2$ ,  $w_t = 0,5$ ,  $w_t = 0,8$  e  $w_t = 1,0$ , segundo a configuração (a) 1 e (b) 2.



(a)



(b)

Figura 11.5: Evolu o das fun  es-objectivo na resolu o de problemas de optimiza  o topol gica hier rquica multiobjective, com um peso do problema t rmico  $w_t = 0,0$ ,  $w_t = 0,2$ ,  $w_t = 0,5$ ,  $w_t = 0,8$  e  $w_t = 1,0$ , segundo a configura  o (a) 1 e (b) 2.

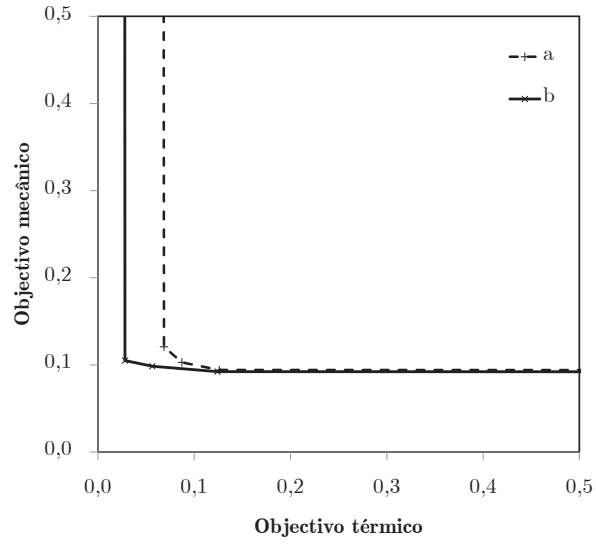


Figura 11.6: Curvas de Pareto de problemas de otimizaão topol3gica hierrquica multiobjetivo, com um peso do problema t3rmico  $w_t = 0,0$ ,  $w_t = 0,2$ ,  $w_t = 0,5$ ,  $w_t = 0,8$  e  $w_t = 1,0$ , segundo a configuraão (a) 1 e (b) 2.

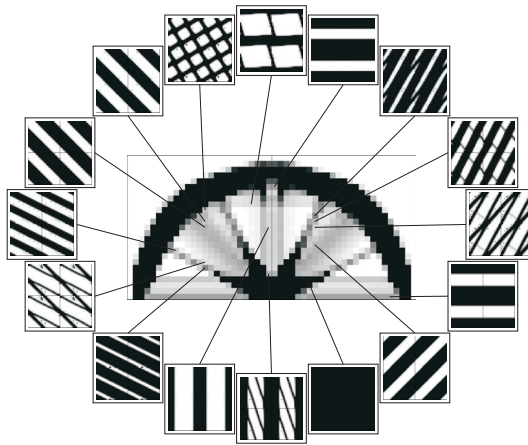


Figura 11.7: Topologias obtidas na aplicaão multiobjetivo de um problema de otimizaão topol3gica hierrquica com um peso do problema t3rmico  $w_t = 0,0$ , comum a ambas as configura3es.

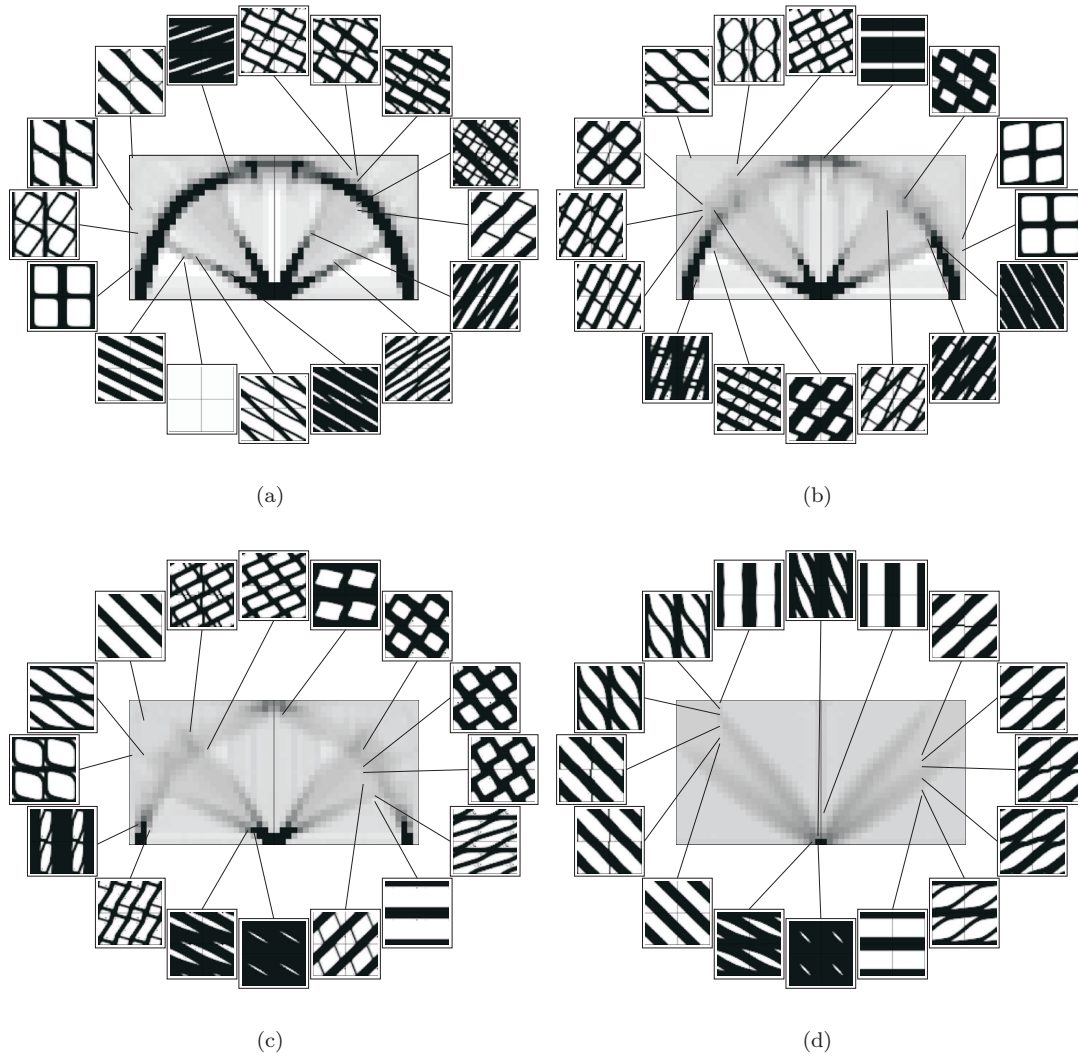


Figura 11.8: Topologias obtidas na aplicação multiobjectivo de um problema de optimização topológica hierárquica, configuração 1, com um peso do problema térmico  $w_t$  de (a) 0,2, (b) 0,5, (c) 0,8 e (d) 1,0.

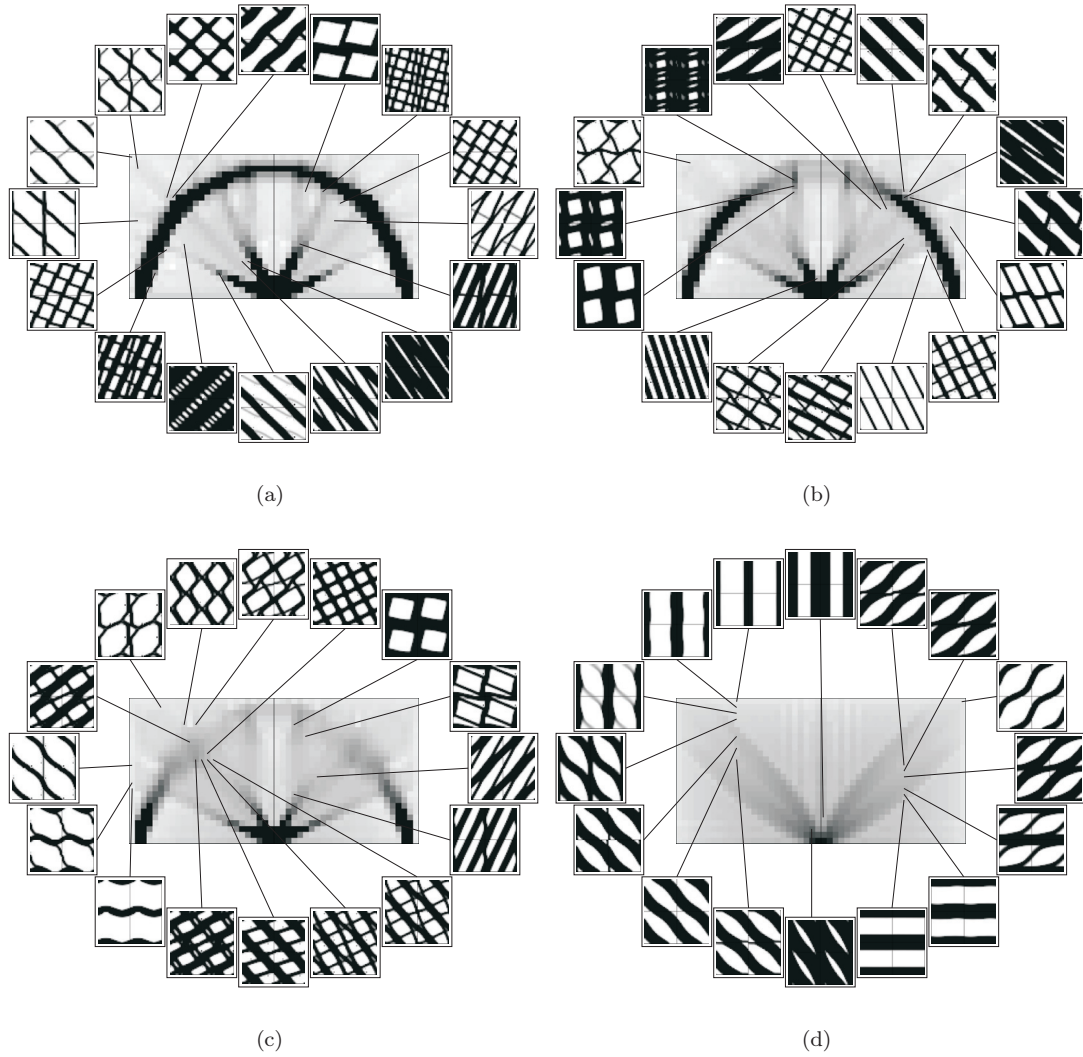


Figura 11.9: Topologias obtidas na aplicação MO de um problema de otimização topológica hierárquica, configuração 2, com um peso do problema térmico  $w_t$  de (a) 0,2, (b) 0,5, (c) 0,8 e (d) 1,0.

original, especialmente com objectivos térmicos e mecânicos, o método dá origem a muito ruído em zonas de densidade microestrutural próxima de  $\mu_{\min}$ . Estes problemas são mais críticos quando se utilizam propriedades de constituintes muito próximas (*e.g.*  $d_m = 0,1$ ). Constatase também que a utilização de estratégias como a H3, que consideram os problemas locais separados, têm menos tendência para gerar estes fenómenos. A utilização de penalizações de densidades menos agressivas ( $p \leq 3$ ) também reduz estes fenómenos, para além de serem menos propensos a problemas de condicionamento e resolução local em objectivos complementares. No entanto, dão frequentemente origem a uma convergência local demasiado lenta ou a CRU com densidades intermédias.

### 11.3 Estratégias Alternativas de Optimização Multiescala

Para além da abordagem hierárquica apresentada na secção e capítulos anteriores, desenvolveram-se neste trabalho algumas estratégias alternativas de cálculo multiescala. O problema geral de optimização hierárquica apresenta algumas limitações em termos de exequibilidade prática das topologias obtidas [Bendsøe 1995], razão pela qual os principais trabalhos apresentados neste sentido surgem em áreas como a biomecânica e a modelação de fenómenos de remodelação óssea [Coelho 2009, Coelho *et al.* 2009]. No sentido de aproximar este tipo de cálculo de abordagens mais coerentes com a produção efectiva de materiais de engenharia, nomeadamente materiais compósitos e celulares para aplicações estruturais, desenvolveram-se estratégias multiescala com vista a controlar o número e a distribuição efectiva de materiais constitutivos (*vd.* Secs. 6.5 e 7.5.1).

Surgem assim, em primeiro lugar, as abordagens H4 e H5. Nestes casos, considera-se apenas uma topologia local para toda a estrutura. O problema de optimização topológica continua a ser multiescala, mas a optimização é feita apenas ao nível de uma microescala isolada. Refira-se que esta abordagem difere da homogeneização inversa no sentido em que os campos macroestruturais evoluem juntamente com a variação da resposta macroestrutural em função da evolução constitutiva usualmente anisotrópica da microestrutura óptima. A estratégia H6, por sua vez, mantém apenas um problema local e controla de forma desacoplada a evolução das variáveis micro- e macroestruturais. Assim, ao contrário da metodologia hierárquica convencional, são obtidas duas topologias definidas micro- e macroestruturais. Neste caso, podem considerar-se parâmetros de resolução distintos nas duas escalas ou mesmo restrições separadas. Finalmente, as estratégias H7 e H8 representam um meio-termo entre a abordagem geral hierárquica e as abordagens H4/H5. A macroescala é dividida em regiões predefinidas e a cada uma corresponde um problema local. Este tipo de estratégia visa uma maior adequação a algumas metodologias usuais de fabrico de componentes em materiais compósitos, onde são definidas divisões geométricas com distribuições específicas de materiais constituintes.

Refira-se que, para além do potencial em termos de exequibilidade construtiva, estas estratégias apresentam vantagens notórias em termos de recursos computacionais face às metodologias hierárquicas convencionais. Por um lado, passa a ser possível a utilização de discretizações macroestruturais refinadas sem se tornar proibitivo em termos de memória e tempos de processamento. Por outro lado, controlando o número de problemas locais a resolver, é possível resolver estes problemas muito mais rapidamente e/ou utilizar malhas locais mais refinadas em busca de detalhe adicional.

Nas secções seguintes retoma-se o problema MBB 2-D apresentado na Secção 9.3.1, utilizando as malhas M1 a M5 (*cf.* Fig. 9.24). Devido às diferenças em termos de recursos necessários, é nestes casos possível utilizar malhas macroestruturais com diferentes níveis de refinamento sem prejuízo relevante dos tempos de computação. Salvo indicação em contrário, a malha local utilizada é constituída por  $40 \times 40$  elementos quadriláteros lineares. A restrição de volume utilizada corresponde a uma fracção volumica  $f_v = 0,5$  e utiliza-se o SIMP convencional ( $d_m = 0,0$ ). Utiliza-se ainda o método das assíptotas móveis na resolução dos diversos problemas.

### 11.3.1 Optimização Topológica Microestrutural

As estratégias H4 e H5 são aqui testadas com os problemas de flexão, corte e tracção, ilustrados na figura 11.10. Foram ainda realizados ensaios de compressão por inversão do problema de tracção, para analisar a coerência dos métodos utilizados. Estes problemas genéricos permitem avaliar de forma global alguns aspectos do comportamento do programa desenvolvido nestas aplicações. Na figura 11.11 ilustram-se as evoluções das funções-objectivo na optimização destes problemas. Apresentam-se as curvas obtidas para o exemplo mais crítico, com a malha macroestrutural mais refinada (M5). Consta-se que as estratégias H4 e H5 dão resultados coincidentes, razão pela qual não aparecem discriminados na figura. Numa fase inicial, permitiu-se que as estratégias H4 e H5 funcionassem, respectivamente, como as estratégias H1 e H3 que lhes dão origem. Nestes casos, a diferença prendia-se como o facto de todos os problemas locais estarem sujeitos às mesmas sensibilidades locais médias. Posteriormente, alterou-se a sua estrutura de modo a utilizar-se o mínimo de memória e resolverem-se apenas os problemas estritamente necessários, isto é, actuando exclusivamente sobre as variáveis correspondentes a um único problema microestrutural. Em qualquer dos casos, o comportamento das diferentes estratégias conduz aos mesmos resultados, apesar de estruturas algorítmicas definitivas diferentes. Não existem alterações à topologia global, sendo a estrutura tratada como se de um material homogéneo fosse constituída, mas existem diferentes respostas ao nível microestrutural. As topologias obtidas na resolução dos diversos problemas apresentados, com diferentes níveis de refinamento macroestrutural, podem ver-se na figura 11.12. Estas topologias ilustrativas representam resultados expectáveis nestas abordagens. Serão abordadas em mais detalhe no decorrer deste texto.

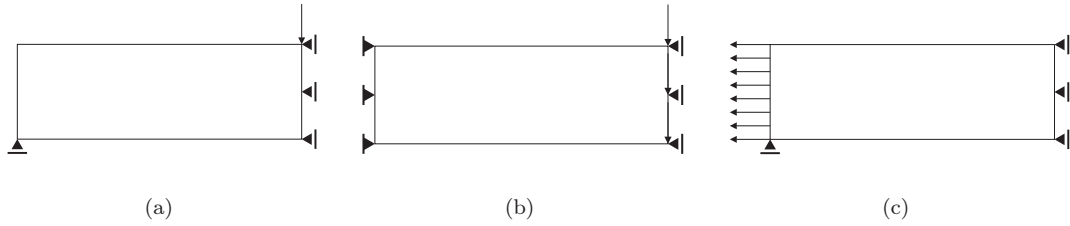


Figura 11.10: Solicitações de teste para optimização topológica multiescala: (a) flexão, (b) corte e (c) tracção.

Para os diversos níveis de refinamento da discretização macroestrutural, observa-se que as curvas obtidas são essencialmente coincidentes em tracção/compressão. No entanto, em corte e especialmente em flexão, verifica-se alguma dispersão e dependência do refinamento de malha. Esta dependência parece ser bastante mais crítica no que diz respeito à malha macroestrutural do que à malha microestrutural, como se mostrará mais à frente. Na figura 11.13 comparam-se as curvas obtidas para o problema de flexão com as diferentes malhas (M1 a M5). Esta dispersão, com piores resultados para malhas mais refinadas, advém de problemas associados à ponderação realizada (*vd.* Eq. 7.69). A utilização de diferentes opções de ponderação leva a diferentes resultados, como se pode observar na figura 11.14. A referência  $h_{\text{opt}} = 1$  corresponde à média volúmica simples de deformações macroestruturais.  $h_{\text{opt}} = 2$  corresponde à ponderação com deformação equivalente ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ), tensão equivalente ( $h_{\text{opt}} = 2.2$ ) e a tensão principal  $\sigma_1$  ( $h_{\text{opt}} = 2.3$ ). Por um lado, verifica-se que em geral se obtém melhores resultados com a ponderação de tensões equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.2$ ), ao mesmo tempo que existem algumas instabilidades com deformações equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ). Apesar de aparentemente semelhantes, a ponderação com tensões em detrimento de deformações tem informação constitutiva adicional, ao passo que o campo de deformações, apesar de resultante de uma determinada resposta, é calculado em termos estritamente geométricos. Em qualquer dos casos, verifica-se que a limitação desta metodologia em problemas como o de flexão

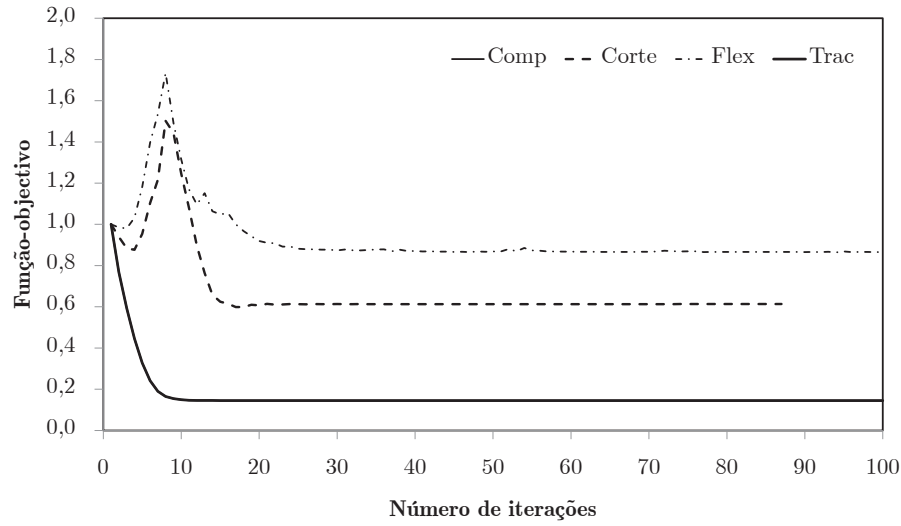


Figura 11.11: Evolução das funções-objectivo, segundo estratégias H4 e H5, para os problemas de teste considerando uma malha M5.

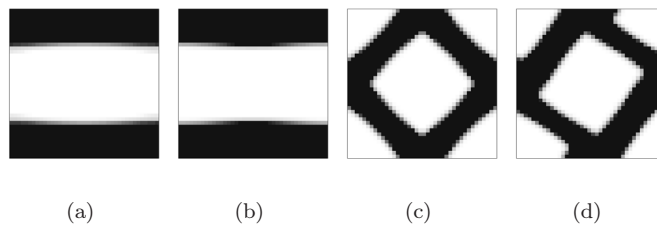


Figura 11.12: Topologias locais obtidas para as solicitações de teste: (a) compressão, (b) tracção, (c) corte e (d) flexão.



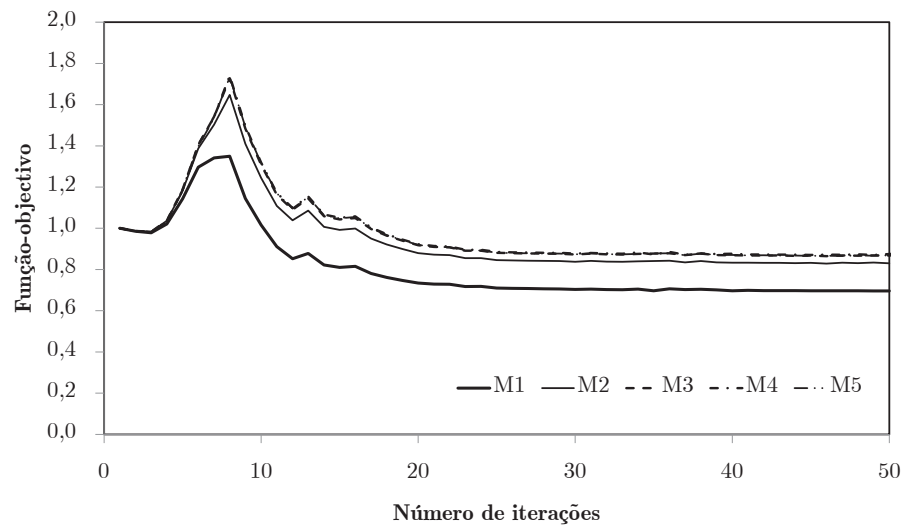


Figura 11.13: Evolução das funções-objetivo para o problema de flexão com diferentes discretizações macroestruturais.

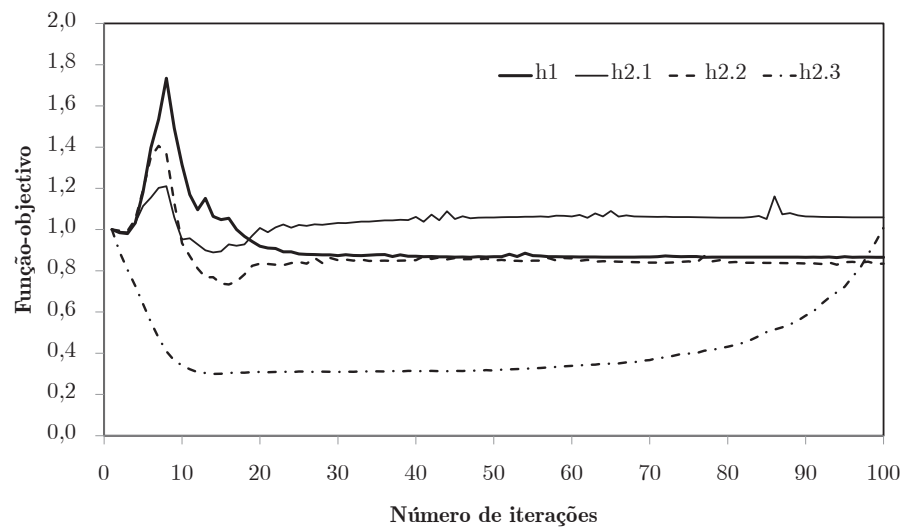


Figura 11.14: Evolução das funções-objetivo para o problema de flexão com diferentes tipos de ponderação e malha M5.

se prende com o facto de a média volúmica tender a anular a influência das regiões mais relevantes. Assim, em vez desta metodologia valorizar a influência das regiões-limite que se encontram à tracção ou à compressão, tende a limitar a sua relevância em detrimento das regiões em torno da linha neutra. É por esta razão que as topologias obtidas tendem muitas vezes a ser próximas das obtidas para o problema de corte ou das obtidas anteriormente em regiões centrais nas resoluções hierárquicas. Em qualquer dos casos, no entanto, as topologias obtidas parecem ser da mesma natureza das soluções por domínios apresentadas na bibliografia [Cherkaev *et al.* 1998]. Note-se ainda que esta limitação tende a ser mais crítica com o maior refinamento da malha macroestrutural. Um problema de flexão de vigas esbeltas tem uma região de tensões axiais nulas no centro transversal (linha neutra). Apesar de esta questão ser menos evidente em vigas menos esbeltas, os extremos transversais do problema de flexão são preponderantes no comportamento da estrutura, com solicitações marcadamente de tracção e compressão. Ao efectuar a média de deformações em toda a estrutura estas regiões tendem a anular-se, resultando em sensibilidades que privilegiam a influência da região mais central da viga. Esta questão é tão mais crítica quanto mais refinada for a malha. Com malhas menos refinadas, em contrapartida, a demarcação destes limites é menos evidente, levando a que uma microestrutura óptima típica de um problema de corte corresponda ainda assim a uma boa resposta. No entanto, este tipo de microestrutura tem uma rigidez muito inferior à necessária na direcção horizontal, essencial à resposta requerida fora da linha neutra. Surge aqui a ponderação com a tensão principal  $\sigma_1$  ( $h_{\text{opt}} = 2.3$ ) para tentar resolver esta questão. Neste caso, são privilegiadas as regiões sujeitas a esforços tendencialmente uniaxiais, resultando em resultados melhores para a optimização deste problema. No entanto, tendem a divergir se o processo não for parado no momento certo. Com a evolução do processo iterativo, a topologia tende a passar por um ponto óptimo, mas a reajustar-se progressivamente para se aproximar a um laminado. Neste caso, a menos que a fase flexível tenha rigidez suficiente, acaba por tornar o material desconexo e a deteriorar os resultados. Refira-se, aliás, que esta se apresenta como uma limitação geral deste trabalho. Torna-se em alguns casos conveniente parar o processo de optimização em momentos específicos. No entanto, constata-se alguma complexidade na definição de critérios de paragem suficientemente fiáveis para não se destruir a convergência noutros casos. Parte destes problemas deve-se ao facto de os campos macroestruturais evoluírem com as topologias locais, levando muitas vezes a um reequilibrar de solicitações e respostas que desestabiliza o processo. Adicionalmente, a utilização de técnicas de filtragem de sensibilidades é condicionante a este nível. Estas fazem com que os gradientes locais efectivamente utilizados sejam ponderados com gradientes vizinhos, originando alguns dos graduais reajustes e simplificações das soluções locais. Tal como verificado anteriormente, estas questões não se colocam sem a utilização de filtros de sensibilidade.

As questões referidas anteriormente podem analisar-se na figura 11.15, onde se mostram topologias locais acompanhadas dos respectivos mapas de anisotropia para cada uma das soluções apresentadas. Como referência, ilustra-se ainda a solução inicial utilizada (Figs. 11.15(s) e (t)), assim como os mapas de anisotropia associados a topologias homogéneas de  $\mu = 0,5$  com penalização (Fig. 11.15(u)) e sem penalização (Fig. 11.15(v)). Verifica-se que a resposta anisotrópica apresentada é coerente com o tipo de solicitação imposto. Este facto é particularmente notório nos problemas de tracção/compressão. Em contrapartida, os problemas referidos anteriormente para os problemas de flexão prendem-se com rigidez demasiado orientada. Há uma tendência a privilegiar orientações diagonais devido à forma como as ponderações são efectuadas. No entanto, as limitações nos problemas de flexão surgem pelo facto de o material, que apresenta elevada rigidez em determinadas direcções, se mostrar demasiado flexível na direcção horizontal, essencial à resposta em flexão. Em boa parte dos casos esta pode apresentar-se mesmo inferior à solução inicial, razão pela qual a minimização da função-objectivo pode indicar resultados tão pouco satisfatórios. O recurso a diferentes ponderações tende a melhorar estes problemas, especialmente ao considerar tensões principais  $\sigma_1$ . Note-se neste caso, no entanto, a deterioração de rigidez quando o material passa a ser mais laminado. Note-se ainda que o recurso a  $\sigma_2$  dá resultados bastante inferiores.

Utilizando propriedades dos constituintes mais próximas, com  $d_m = 0,1$ , os resultados, como esperado, são bastante melhores. Isto deve-se não só à maior rigidez da fase menos rígida mas

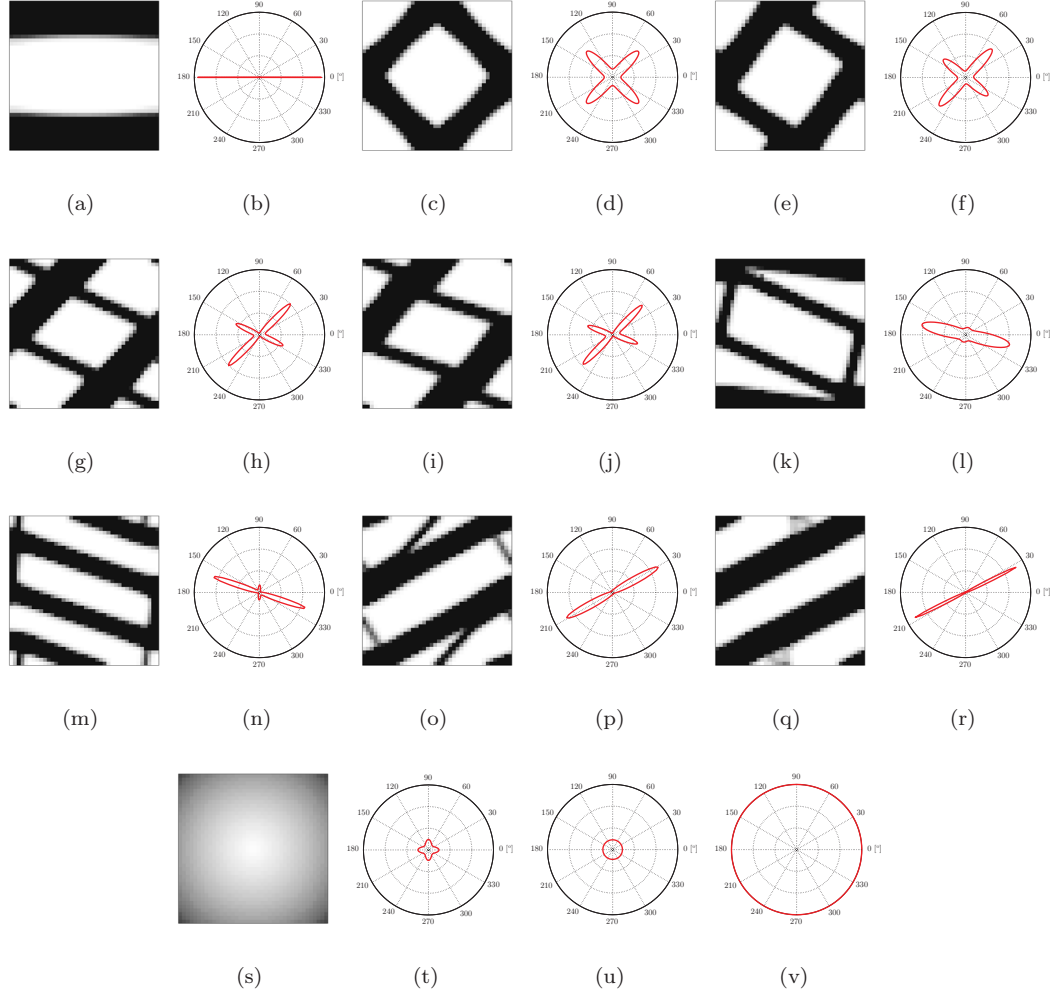


Figura 11.15: Topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para diferentes microestruturas em optimização multiescala H5 para diferentes solicitações e parâmetros: (a, b) compressão, (c, d) corte, (e, f) flexão, (g, h) flexão com ponderação de deformação equivalente, (i, j) flexão com ponderação de tensão equivalente, (k, l) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_1$  em iteração intermédia, (m, n) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_1$ , (o, p) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_2$  em iteração intermédia, (q, r) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_2$ , (s, t) solução inicial, e topologias homogêneas de (u)  $\mu = 0,5$  e (v)  $\mu = 0,5$  sem penalização.

também ao facto de deixar de ser relevante a questão das fases desconexas. Além disso, tende-se para soluções mais simples e muitas vezes mais coerentes com a produção de materiais compósitos. A figura 11.16 ilustra as topologias locais e os mapas de anisotropia obtidos na resolução dos problemas apresentados com esta relação de materiais constituintes para o caso menos favorável de ponderação anterior ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ), mostrando-se que mesmo neste caso os resultados são bastante melhores. Isto é corroborado pelas curvas de evolução das funções-objectivo apresentadas na figura 11.17. Verifica-se uma minimização mais evidente da energia de deformação. No caso da ponderação usando a tensão principal  $\sigma_1$  ( $h_{\text{opt}} = 2.3$ ), apresentada como exemplo, observa-se que a função-objectivo é reduzida para níveis aproximados dos anteriores, mas, mais importante, é significativamente mais estável. Refira-se ainda que as curvas de evolução da função-objectivo apresentam um comportamento melhor mesmo sem partir de uma solução inicial tendencialmente flexível pela penalização das densidades intermédias. A generalidade dos análises efectuadas neste capítulo não recorre a esta relação de propriedades constituintes por camuflar muitos dos efeitos observados.

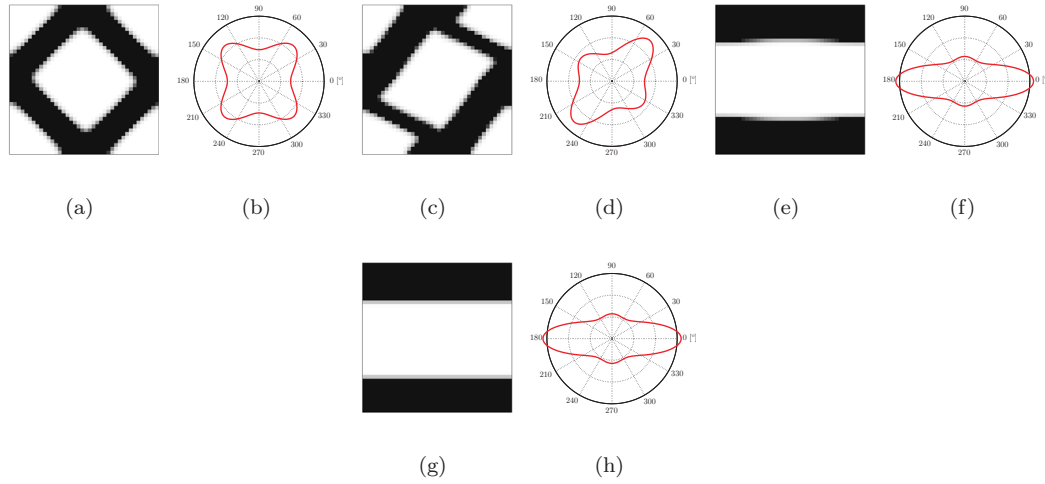


Figura 11.16: Topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para diferentes microestruturas em optimização multiescala H5 segundo diferentes sollicitações, com  $d_m = 0,1$ : (a, b) corte com ponderação de deformação equivalente, (c, d) flexão com ponderação de deformação equivalente, (e, f) tracção com ponderação de deformação equivalente e (g, h) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_1$ .

Na figura 11.18 mostram-se ainda topologias obtidas para malhas com diferentes níveis de refinamento, de  $20 \times 20$  e  $60 \times 60$  elementos finitos. Os resultados são semelhantes, constatando-se que a malha da microescala influencia significativamente menos os resultados obtidos do que a macroestrutural. Verifica-se, no entanto, que a falta de detalhe de malhas pouco refinadas influencia negativamente o comportamento geral, com materiais tendencial e ligeiramente menos rígidos. Esta falta de detalhe pode ainda tornar-se mais relevante para casos de microestruturas óptimas mais complexas.

### 11.3.2 Optimização Topológica Multiescala Desacoplada

Uma estratégia alternativa aqui utilizada corresponde ao chamado modo desacoplado, H6. Neste caso, o problema global é constituído por dois problemas distintos de optimização macroestrutural e optimização microestrutural. Cada um deles é independente, exceptuando pelo facto de o problema microestrutural utilizar o campo de densidades macroestrutural como factor de ponderação

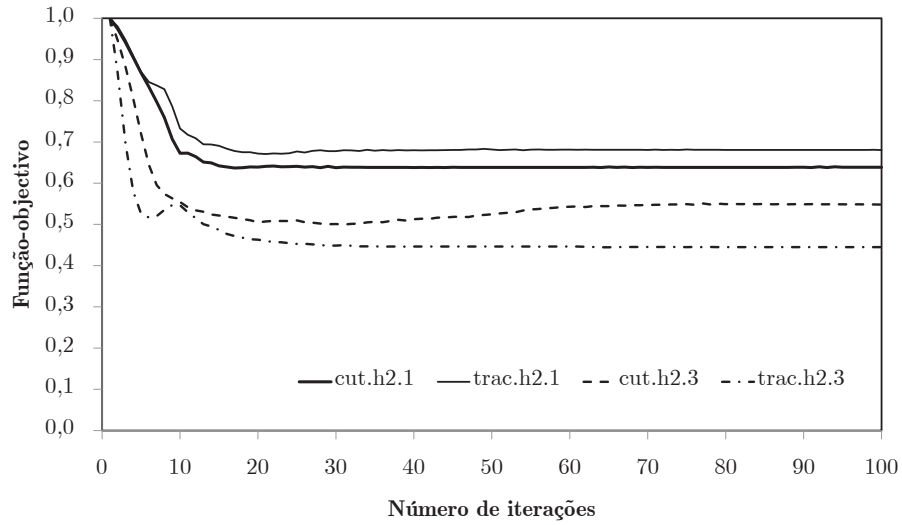


Figura 11.17: Evolução das funções-objetivo segundo diferentes solicitações (corte e flexão), com ponderação usando deformações equivalentes ( $h_{opt} = 2.1$ ) e tensão principal  $\sigma_1$  ( $h_{opt} = 2.3$ ).

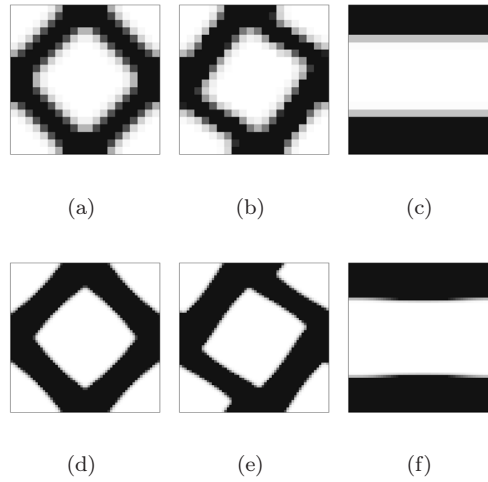


Figura 11.18: Topologias locais óptimas obtidas com diferentes níveis de refinamento de malha, com (a-c)  $20 \times 20$  e (d-f)  $60 \times 60$  elementos finitos, em (a, d) corte, (b, e) flexão e (c, f) tracção.

e do problema macroestrutural utilizar como base constitutiva a topologia microestrutural óptima. Continua neste caso a haver apenas uma iteração de cada um dos problemas por cada iteração global onde cada campo de densidades é actualizado de forma independente.

Na figura 11.19 apresenta-se a evolução da função-objectivo, para o problema de flexão resolvido anteriormente com a malha macroestrutural M4. Apresentam-se três curvas distintas, características do carácter desacoplado desta estratégia. Por um lado, o problema H6 geral corresponde à optimização simultânea em ambas as escalas, com restrições de volume  $f_v = 0,5$  nos dois casos. Por sua vez, os restantes limites correspondem à fixação da restrição de volume macro- ou microestrutural em  $f_v = 1,0$ . Estes casos, pelo facto de se fixar uma das escalas, correspondem à optimização macroestrutural e à optimização do tipo H5 apresentada anteriormente, respectivamente. Utilizou-se como referência o pior caso anterior, de ponderação utilizando deformações equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ). Verifica-se que estes casos-limite correspondem exactamente aos resultados obtidos com as metodologias de optimização correspondentes, como ilustrado na figura 11.20, traduzindo um correcto funcionamento do modo H6 assim como a sua flexibilidade. O modo geral apresenta uma redução mais significativa, fruto da actuação simultânea sobre ambas as escalas de forma independente e com penalizações próprias. Assim, no modo H6 geral tende a haver sempre uma redução acentuada no objectivo pela conjugação das duas escalas e os resultados obtidos podem induzir conclusões erradas acerca da sua eficácia. Apesar das situações-limite funcionarem de modo coerente, assim como os modos intermédios, existem alguns riscos na utilização desta metodologia. Como se pode observar nas figuras 11.21, a variedade de soluções é assinalável. Nestas figuras apresenta-se a resolução de alguns dos problemas apresentados anteriormente, assim como a influência de diferentes esquemas de ponderação. Verifica-se que a influência das duas escalas é coerente, com cada uma das topologias a aparecer como resposta orientada de acordo com a influência da outra. No entanto, é normal uma das escalas tornar-se dominante no processo de convergência, mesmo utilizando actualizações muito lentas. Constata-se ainda a dificuldade da macroescala responder coerentemente a solicitações de campo homogéneo como as de tracção. Este caso corresponde a um problema de múltiplas soluções, tendo como resultado o oscilar em torno da solução inicial ou o desestabilizar do processo para uma das virtualmente infinitas soluções possíveis.

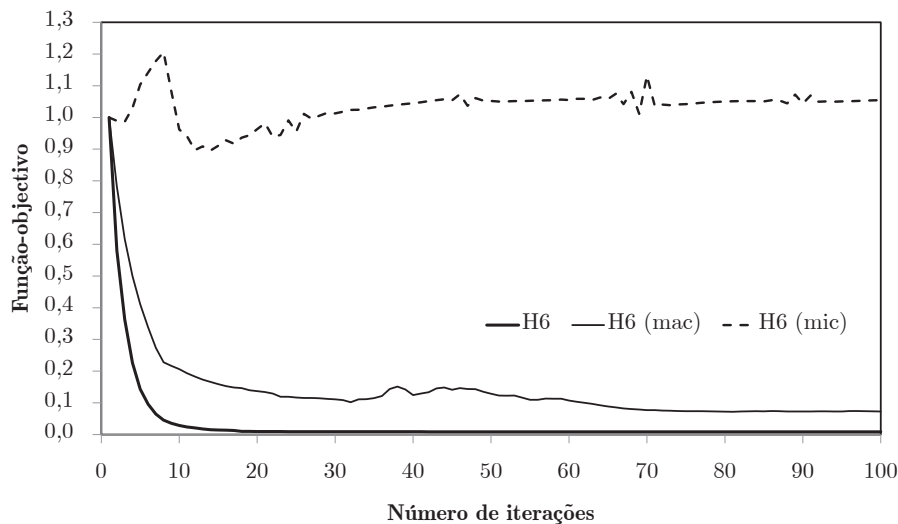


Figura 11.19: Evolução das funções-objectivo de um problema de flexão com optimização multiescala desacoplada e ponderação com deformações equivalentes. Caso geral e problemas-limite micro- e macroestrutural.

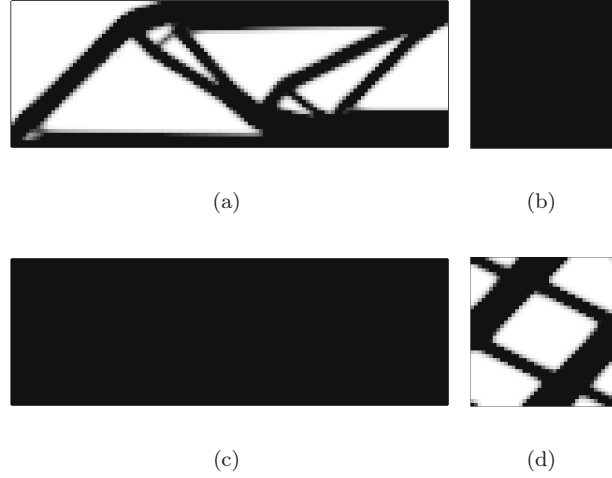


Figura 11.20: Topologias óptimas de um problema de flexão com optimização multiescala desacoplada: problemas-limite (a, b) micro- e (c, d) macroestrutural.

Pode concluir-se que este modo de optimização permite a optimização simultânea de ambas as escalas, conciliando o funcionamento de diferentes tipos de optimização já apresentados. No entanto, esta metodologia apresenta também alguma dependência relativamente a diversos factores, exigindo algum cuidado na sua utilização e mais desenvolvimento.

### 11.3.3 Optimização Topológica Multiescala em Subdomínios

Os modos de optimização H7 e H8 representam uma alternativa na resolução de problemas multiescala, controlando o número de problemas locais da abordagem hierárquica. Nestes casos, utilizam-se procedimentos derivados do modo H5 mas com ponderação por regiões. Assim, existe um problema local por cada região predefinida na macroescala. Pretende-se aqui fazer a divisão do domínio de forma a procurar o melhor compromisso entre a determinação do material óptimo e o fabrico dos componentes estruturais. A distinção entre os modos H7 e H8 prende-se essencialmente com a forma como são controladas as densidades macroestruturais. No primeiro caso estas são actualizadas, seguindo o mesmo esquema utilizado no modo H3, enquanto no segundo caso estas são mantidas fixas e iguais à restrição global de volume.

Na figura 11.22 apresentam-se alguns exemplos de divisões de domínio utilizadas nesta análise. Retomando o problema anterior de flexão com ponderação de deformações equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ), como um dos mais desfavoráveis dos apresentados, mostram-se na figura 11.23 as evoluções das funções-objectivo para o caso de dois subdomínios horizontais e diferentes níveis de refinamento de malha macroestrutural utilizando a metodologia H7. Constata-se neste caso, com apenas dois problemas locais e duas CRU, que os resultados obtidos são muito melhores que os anteriores. No entanto, a mesma análise para domínios verticais (*vd.* Fig. 11.24) conduz a conclusões contraditórias. Isto deve-se ao facto de as divisões verticais acentuarem a questão anteriormente referida de desadequação deste tipo de ponderação ao problema de flexão. Enquanto as divisões horizontais permitem controlar o problema de anular a influência das regiões limites em flexão, as divisões verticais acentuam este problema pelo facto de corresponderem a ponderações sobre vigas artificialmente menos esbeltas. Assim sendo, conclui-se que este modo de funcionamento requer uma correcta avaliação de engenharia do problema a resolver, por forma a definir divisões coerentes com as solicitações de serviço dos componentes a fabricar. Refira-se que se iniciou neste trabalho um esquema de divisão automática. Na figura 11.25 apresenta-se um exemplo de divisão

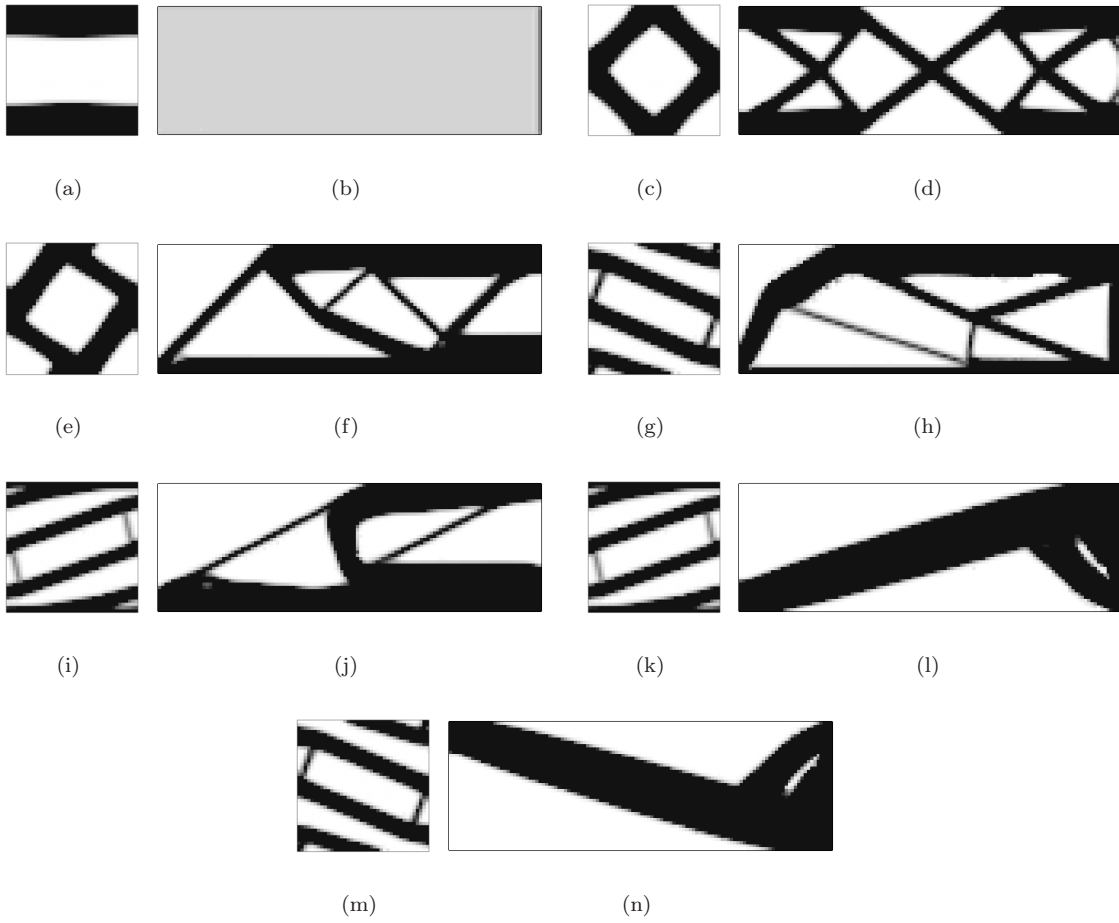


Figura 11.21: Topologias óptimas de problemas de optimização multiescala desacoplada: (a, b) tracção, (c, d) corte, (e, f) flexão, (g, h) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_1$ , (i, j) flexão com ponderação de tensão principal  $\sigma_2$ , (k, l) corte com ponderação de tensão principal  $\sigma_1$  e (m, n) corte com ponderação de tensão principal  $\sigma_2$ .

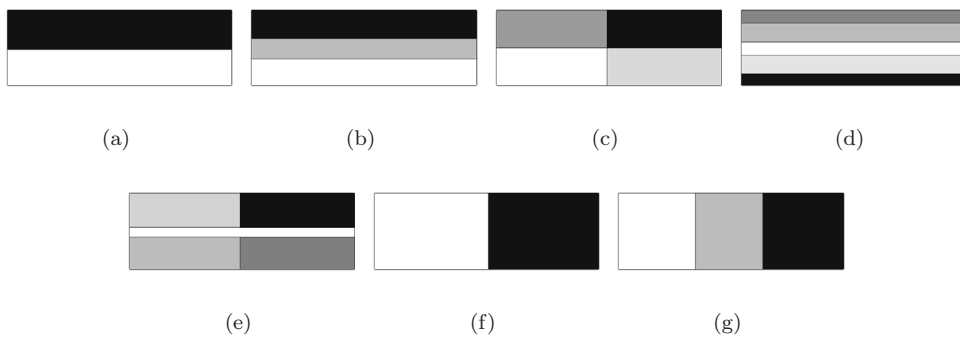


Figura 11.22: Ilustração de diferentes divisões de domínio, horizontais e verticais, utilizadas para teste dos modos de optimização multiescala H7/8: (a) 2h, (b) 3h, (c) 4h, (d) 5h, (e) 5v, (f) 2v e (g) 3v.



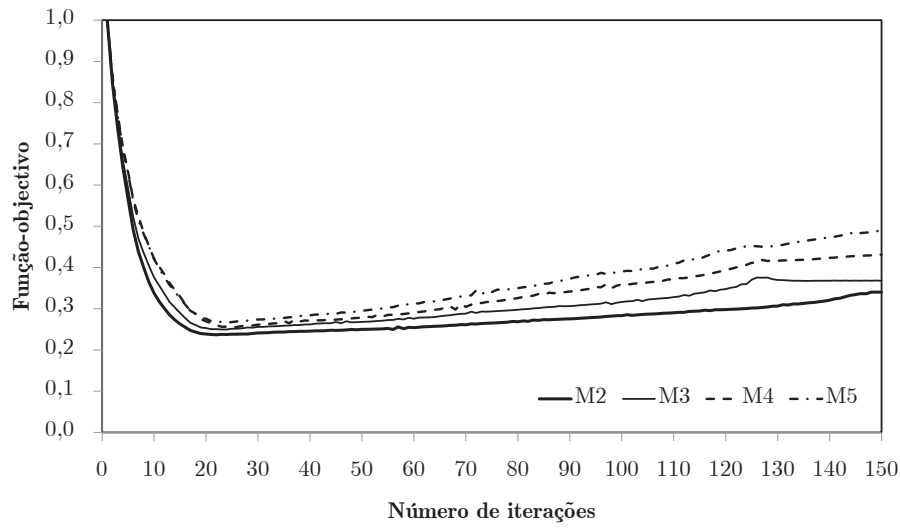


Figura 11.23: Evolução das funções-objetivo na optimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5.

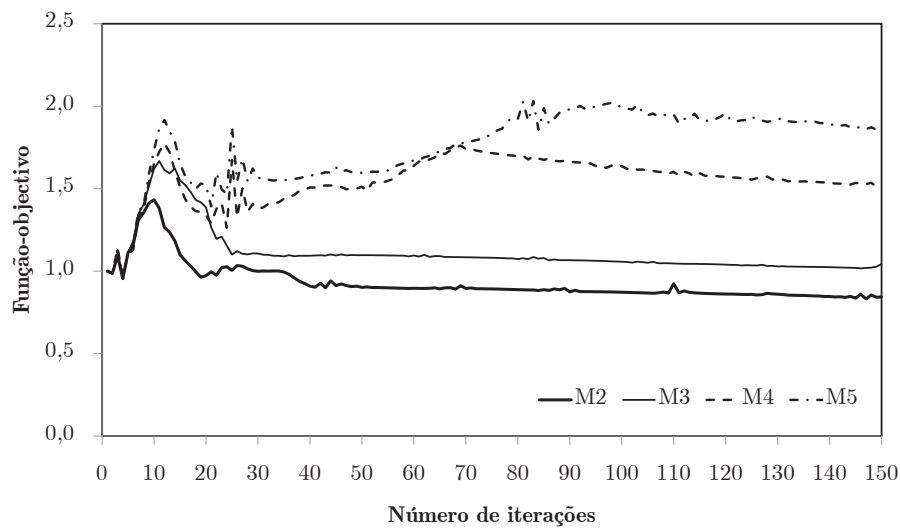
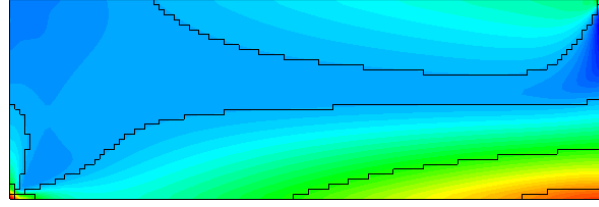
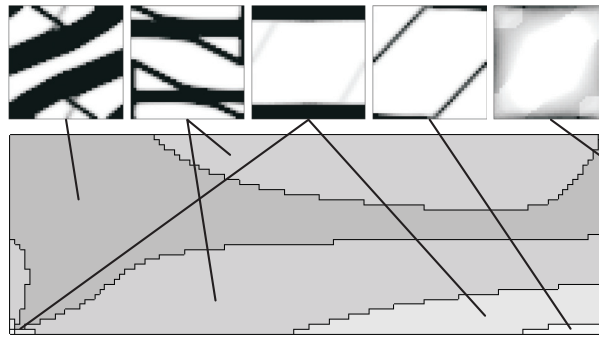


Figura 11.24: Evolução das funções-objetivo na optimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios verticais e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5.

automática segundo isolinhas de tensões principais (*e.g.*  $\sigma_1$ ). No entanto, os resultados obtidos demonstram a necessidade de maior desenvolvimento a este nível.



(a)



(b)

Figura 11.25: Exemplo de (a) divisão automática em 5 regiões através de isovalores de tensão principal  $\sigma_1$ , com (b) distribuição de densidades macroestruturais e topologias microestruturais.

Retomando as divisões predefinidas, a figura 11.26 apresenta curvas de evolução da função-objectivo para diferentes combinações de domínios predominantemente horizontais. Utiliza-se como exemplo a malha macroestrutural M4. Os piores resultados são obtidos para apenas duas divisões, já que um número maior de subdomínios coerentes permite que cada região contribua de melhor forma para o desempenho global da estrutura. Comparando novamente com a figura 11.23, observa-se que a divisão em dois domínios apresenta aqui uma gradual deterioração dos resultados. No entanto, como se pode observar na figura 11.27, verifica-se que os multiplicadores de Lagrange associados às restrições locais de volume,  $\lambda$ , evoluem de forma estável e coerente. Este fenómeno corresponde à tendência referida anteriormente de algumas topologias locais evoluírem gradualmente para laminados. Este fenómeno, na metodologia H7, parece ser controlado com a ponderação, utilizando tensões equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.2$ ) em vez de deformações, como se pode verificar na figura 11.28. Com esta ponderação, a topologia local que conduz à deterioração dos resultados estabiliza a partir de dado ponto, sem a tendência para o desligar de fases constituintes observada anteriormente. Estas diferenças estão associadas aos campos utilizados para ponderação. Na realidade, mesmo os campos iniciais são diferentes pela influência da topologia local inicial anisotrópica sobre o campo de tensões. Isto acentua-se com o diferenciar das soluções locais ao longo do processo iterativo, como se ilustra na figura 11.29. Note-se ainda a influência das diferentes propriedades locais nos deslocamentos, com o caso de ponderação com deformações equivalentes a apresentar disparidades visíveis na forma como cada região da estrutura é deformada.

Nas figuras 11.30 e 11.31 apresentam-se algumas topologias obtidas nos problemas de flexão com diferentes divisões de domínio. A cor de cada região da macroescala representa a densidade

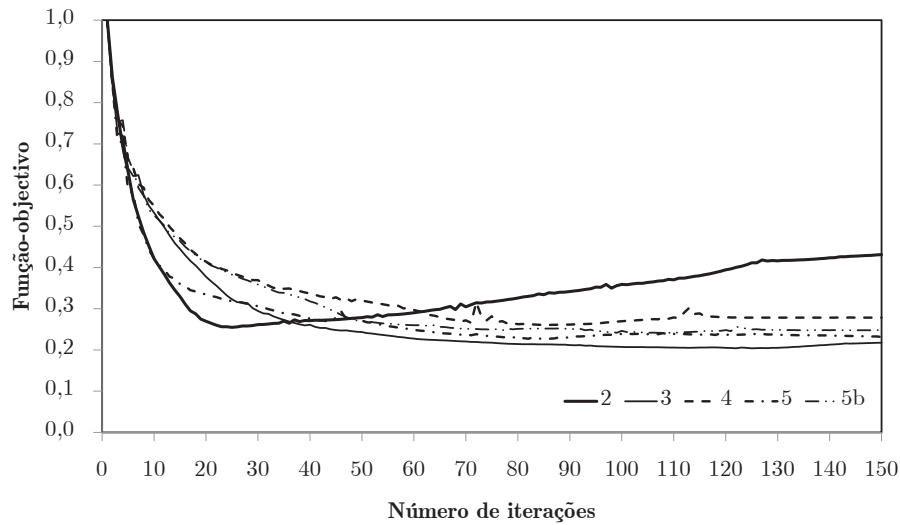


Figura 11.26: Evolução das funções-objectivo na optimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com diferentes divisões horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4.

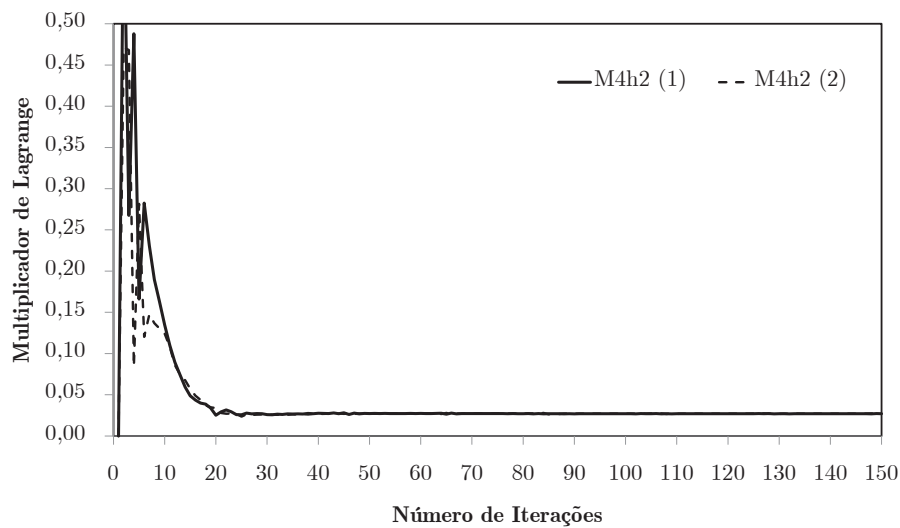


Figura 11.27: Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume,  $\lambda$ , na optimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4.

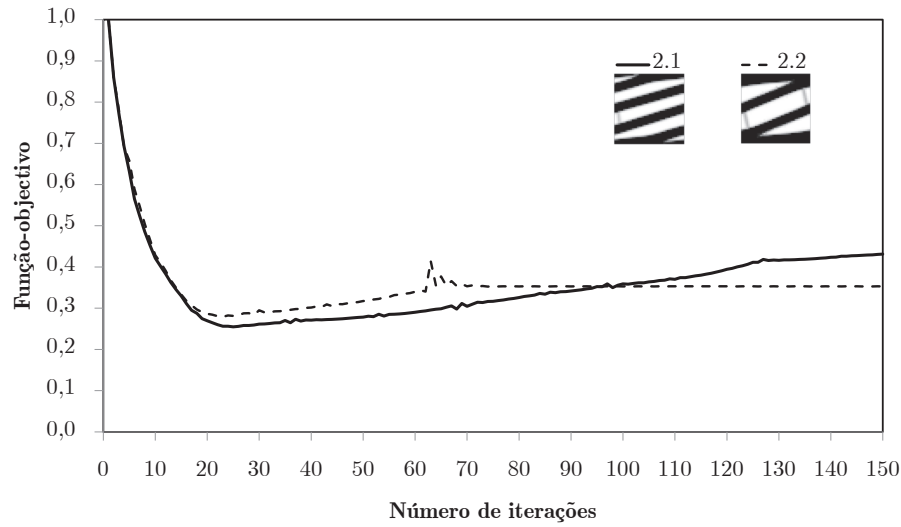


Figura 11.28: Evolução das funções-objetivo na optimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com duas divisões horizontais e ponderação com deformações ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ) ou tensões ( $h_{\text{opt}} = 2.2$ ) equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4.

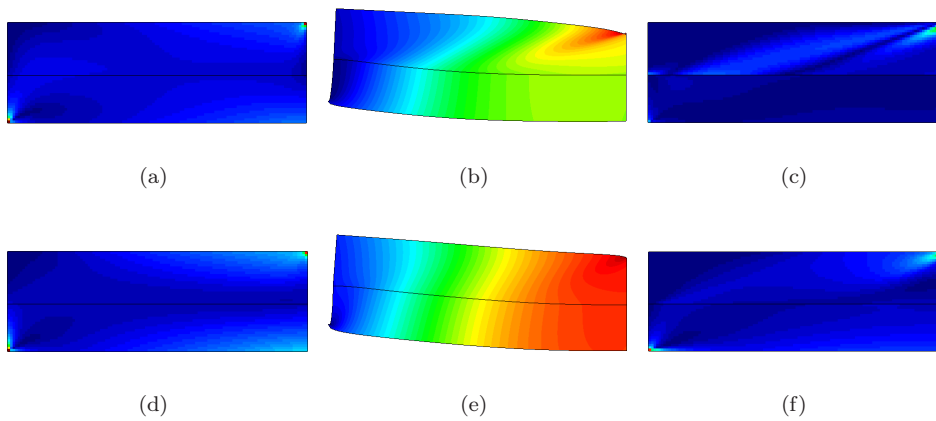


Figura 11.29: Ilustração do comportamento da estrutura num problema de optimização topológica multiescala por regiões, segundo o modo H7, com ponderação de (a-c) deformações e (d-e) tensões equivalentes: (a, d) campo inicial, (b, e) deformada e (c, f) campo final.

local da CRU associada, segundo a mesma escala utilizada na topologia microestrutural. Observa-se alguma variedade de topologias locais, assim como alguns casos onde se apresentam oscilações sobre densidades intermédias. Estas correspondem a oscilações entre a densidade macroestrutural e a resposta local, tendendo a resultar em algumas regiões de cinzento. Tendem a corresponder, no entanto, a oscilações em torno topologias comuns nos restantes resultados aqui apresentados.

O modo de funcionamento H8, sem alteração das densidades globais, apresenta-se como menos permeável a este tipo de problema. Neste caso, a densidade mantém-se constante em toda a macroescala apesar da evolução topológica de cada uma das microescalas. Na figura 11.32 mostra-se a evolução das funções-objectivo com duas divisões horizontais ou verticais, e discretizações macroestruturais entre M2 e M5, utilizando uma ponderação de deformações equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.1$ ). Constata-se novamente, nos casos de divisão horizontal, um gradual deteriorar da solução pela tendência de evolução para topologias do tipo laminado. Este é um fenómeno que, mais uma vez, parece não ser notório com mais de dois domínios. Além disso, constata-se que a solução apresentada anteriormente de recorrer a ponderação em termos de tensões equivalentes permite o seu controlo. No que diz respeito aos casos de divisões verticais, os resultados são aqui bastante melhores do que os apresentados com o modo H7. Isto pode ver-se na figura 11.33, onde se comparam as evoluções das funções-objectivo para a malha M4 com duas divisões horizontais e verticais. Enquanto as soluções são praticamente coincidentes no caso de divisão horizontal, as divisões verticais deterioram claramente as soluções no caso H7. Isto deve-se ao facto de esta metodologia tender a deslocar material de um domínio para o outro por actuação sobre as densidades macroestruturais. Esta actuação leva a desvios que podem acarretar alguma inércia na sua correcção por necessidade simultânea de adaptação da topologia microestrutural. Este fenómeno, no entanto, não ocorre no modo H8 pelo facto de o campo global de densidades se manter constante. É também por esta razão que as topologias obtidas neste modo de funcionamento são usualmente mais definidas, como se pode verificar nos exemplos apresentados nas figuras 11.34. Para permitir uma melhor comparação com os exemplos apresentados no modo H7, as topologias ilustradas foram obtidas com a ponderação de tensões equivalentes ( $h_{\text{opt}} = 2.2$ ). No geral, verifica-se que o modo H8 é mais rápido que o modo H7 e tende a ser menos sensível às condições e aos parâmetros de análise. O modo H8 conduz normalmente a melhores resultados. Com tempo suficiente e algum cuidado na selecção de parâmetros de cálculo, o modo H7 tem potencial para fornecer melhores resultados, mas verifica-se que os benefícios são mínimos.

No geral, pode concluir-se que as metodologias apresentadas representam uma boa alternativa à optimização hierárquica. Revelam-se muito menos onerosas em termos computacionais e conduzem a resultados que permitem uma maior adequação ao fabrico de componentes e estruturas em materiais compósitos e celulares.

## 11.4 Exemplos de Aplicação 3-D

Nesta secção apresentam-se dois exemplos gerais de aplicação, utilizando as metodologias abordadas anteriormente em aplicações 3-D. Em qualquer dos casos, utiliza-se uma malha microestrutural de  $30 \times 30 \times 30$  elementos finitos hexaédricos lineares. Utilizam-se nos exemplos apresentados as estratégias H5, H6, H7 e H8, com ponderação simples de campos de deformações macroestruturais ( $h_{\text{opt}} = 1$ ) e SIMP padrão, e restrições de volume de  $f_v = 0,5$ .

O primeiro exemplo consiste no problema de elasticidade linear ilustrado na figura 11.35. A viga apresentada é encastrada numa extremidade e sujeita a esforços de flexão e torção. Estes esforços podem ser sobrepostos, resultando num carregamento total, ou optimizados como casos alternativos de um problema de carregamentos múltiplos (ML). Apresentam-se ainda as divisões em dois ou três domínios para a aplicação das metodologias H7 e H8 (*vd.* Figs. 11.35(d,e)).

As curvas de evolução das funções-objectivo correspondentes a exemplos de resolução destes problemas são apresentadas na figura 11.36. Observa-se antes de mais um comportamento geral coerente com o verificado anteriormente para casos bidimensionais. Verifica-se uma redução efectiva

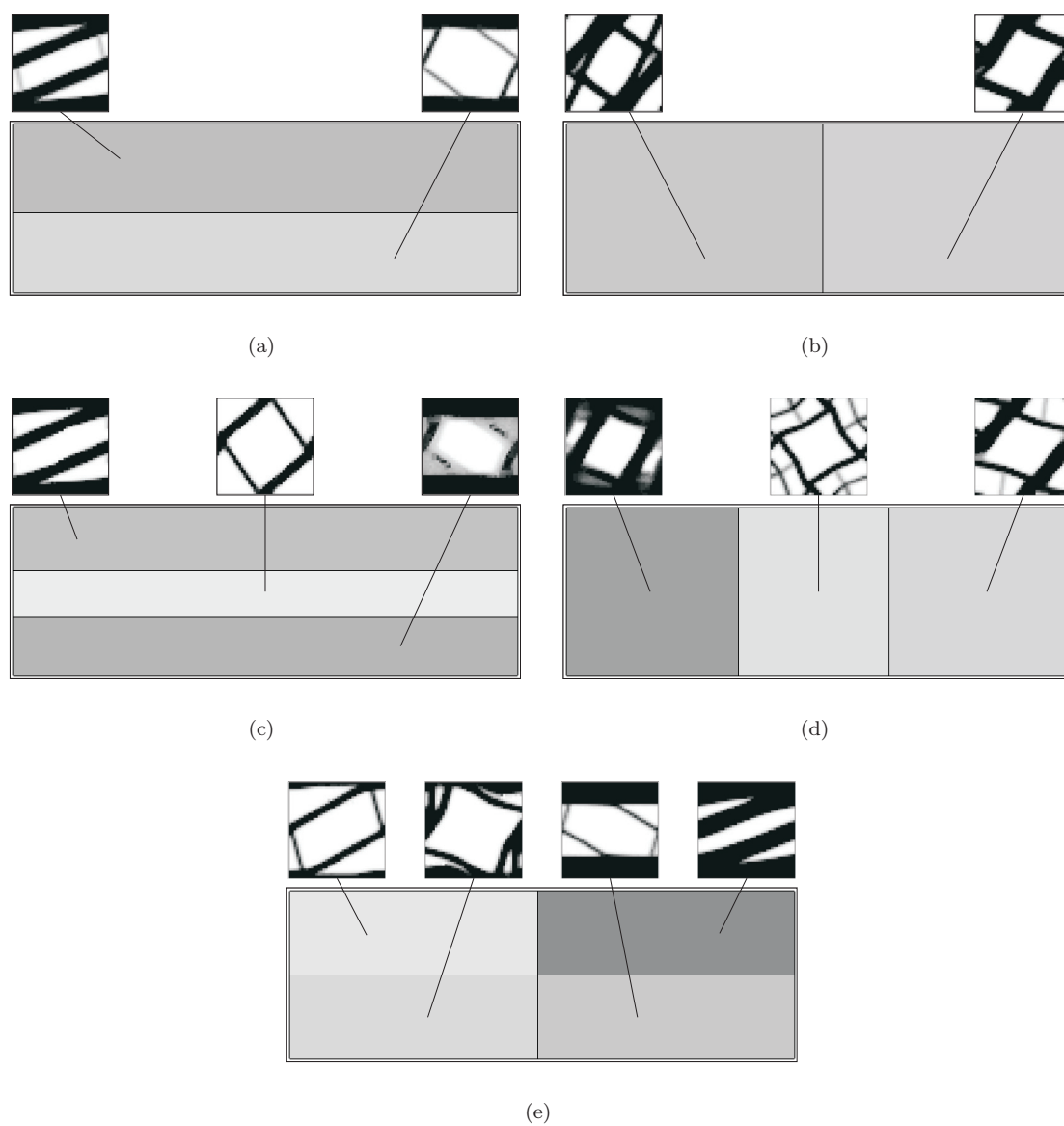


Figura 11.30: Topologias óptimas obtidas na otimização multiescala por domínios H7 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (2 a 4 regiões).

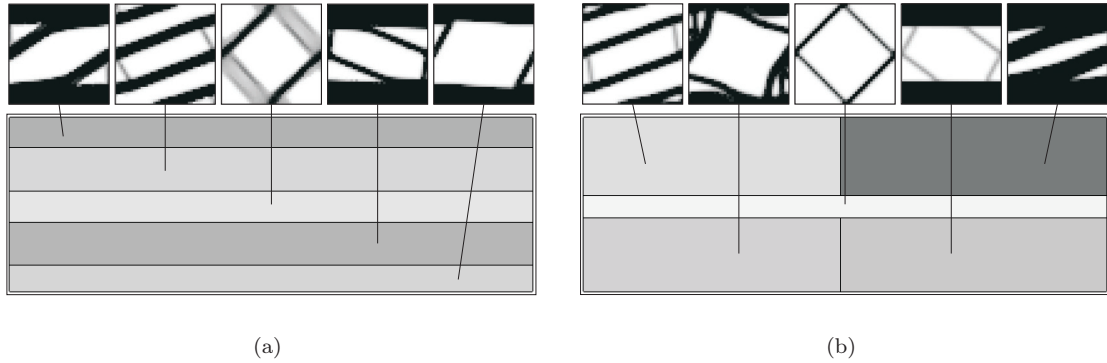


Figura 11.31: Topologias ótimas obtidas na otimização multiescala por domínios H7 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (5 regiões).

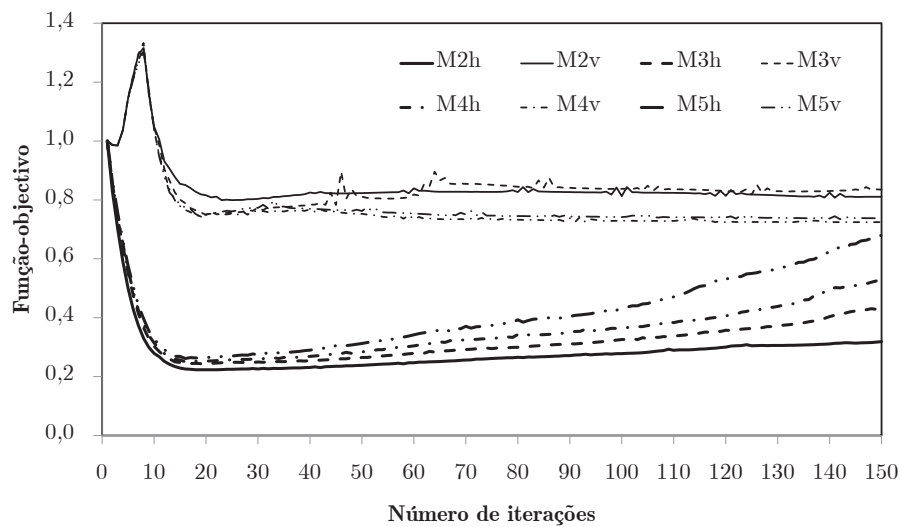


Figura 11.32: Evolução das funções-objetivo na otimização multiescala por regiões H8 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais ou verticais, e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5.

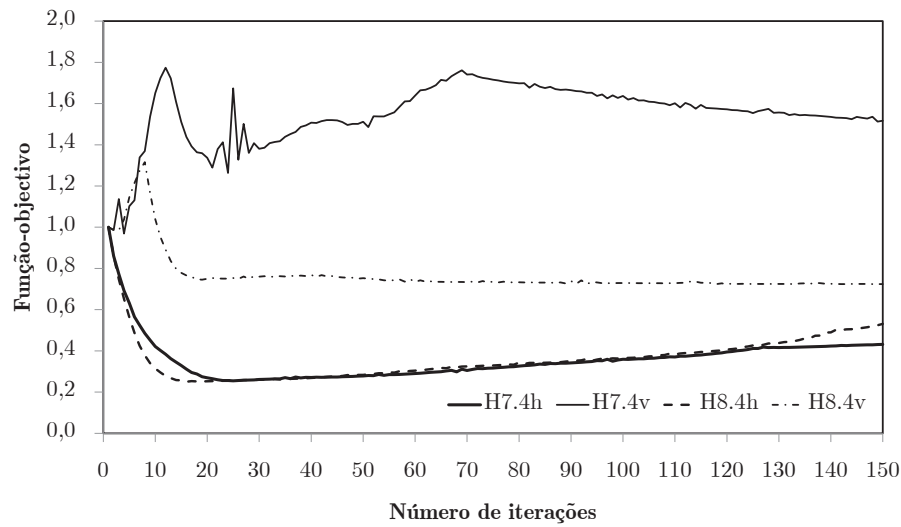


Figura 11.33: Comparação entre os modos H7 e H8 da evolução das funções-objetivo na optimização multiescala por regiões de um problema de flexão com quatro subdomínios horizontais ou verticais, e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo da malha macroestrutural M4.

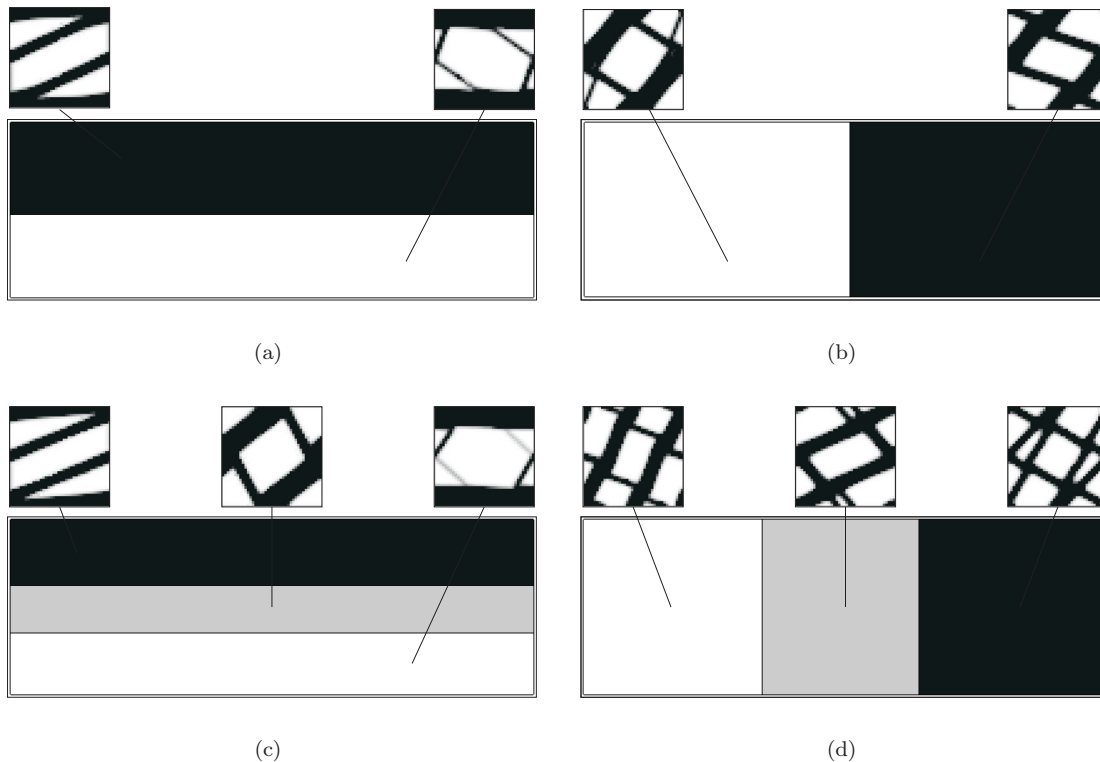


Figura 11.34: Exemplos de topologias óptimas obtidas na optimização multiescala por domínios H8 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (2 e 3 regiões).



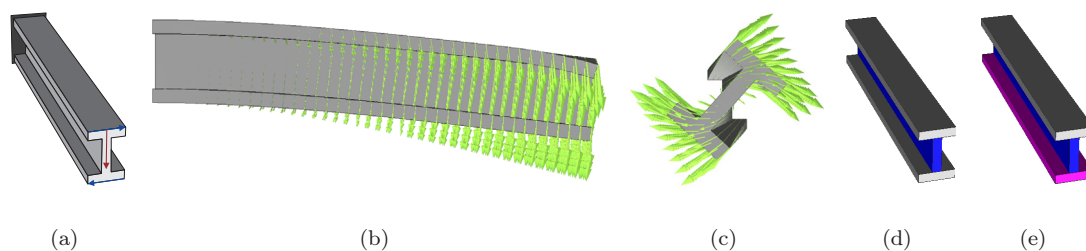


Figura 11.35: Definição de um problema 3-D de (a) flexão e torção de uma viga encastrada, com representação da deformada de (b) flexão e (c) torção. Definição da separação de volumes, (d) 2 e (e) 3, para optimização multiescala por domínios.

do objectivo (minimização da energia de deformação), mas com alguma instabilidade nas metodologias H5. No entanto, esta redução na função-objectivo é baixa face à solução inicial, especialmente no caso de imposição conjunta dos dois carregamentos. Constata-se também que a evolução inicial das funções-objectivo é muito semelhante entre os casos de um e dois problemas locais. No caso de apenas um problema local (H5), antes da função-objectivo começar gradualmente a aumentar e a curva correspondente se separar definitivamente dos exemplos de duas regiões (H7(2)), existem ainda algumas regiões de densidades locais intermédias. Com a definição de duas fases distintas e do detalhe a elas associado, a resposta da solução obtida passa a ser pior do que a evolução inicial deixaria antever. No caso de múltiplas regiões isto não acontece, já que o facto de existirem dois problemas locais corresponde efectivamente a uma melhor distribuição de material e consequentemente a uma melhor resposta. Isto é ainda mais notório no caso de três regiões distintas, onde se constata que a resposta da estrutura é acentuadamente melhor. Isto deve-se também à forma como as regiões macroestruturais foram definidas, separadas em alma e banzos de acordo com o comportamento dominante previsto para este tipo de elemento estrutural. Salienta-se ainda, à semelhança do observado anteriormente, o facto de o modo de densidade macroestrutural constante (H8) permitir uma resposta ao nível do modo de densidade macroestrutural variável (H7). Além disso, converge mais rapidamente e resulta em soluções mais definidas.

As topologias obtidas na resolução dos problemas apresentados podem visualizar-se nas figuras 11.37 e 11.38, correspondentes à utilização de metodologias H5 e H7/8, respectivamente. No caso de um problema local, utilizando a metodologia H5, as topologias apresentadas na figura 11.37 tendem a apresentar uma natureza aproximada a um laminado, associado à solução geral obtida para a resolução isolada do problema de flexão (*vd.* Fig. 11.37(e)). O detalhe adicional surge como resposta à inclusão do problema de torção (*vd.* Fig. 11.37(f)). Verifica-se, aliás, que o problema de torção se revela bastante instável, tendendo a divergir quando resolvido isoladamente e criando algumas oscilações nas resoluções combinadas. Um exemplo onde se verifica uma deterioração da solução com a definição do detalhe da solução corresponde ao caso de carregamento simultâneo. Neste caso, a solução óptima (*vd.* Fig. 11.37(b)) revela-se menos rígida que algumas soluções intermédias (*vd.* Fig. 11.37(c)), como referido anteriormente. No entanto, estas são caracterizadas por alguma indefinição topológica que, pela distribuição de densidades intermédias, sugere uma resposta artificialmente melhor. À medida que estas são penalizadas, a solução torna-se mais definida apesar de se deteriorar um pouco a resposta. Refira-se ainda que a utilização de propriedades de constituintes mais próximas (*e.g.*  $d_m = 0,05$ ), acentua a tendência para as topologias conduzirem a respostas próximas do caso de flexão (*vd.* Fig. 11.37(e)). No que diz respeito à optimização multiescala por domínios, as topologias ilustradas na figura 11.38 correspondem a uma resposta conjunta superior ao caso de 1 problema local único. Note-se, no entanto, tal como verificado nos exemplos 2-D, alguma indefinição em algumas soluções com a metodologia H7 (*vd.* Fig. 11.38(b)). Atente-se ainda nas soluções apresentadas para os casos de 3 subdomínios macroestruturais. As

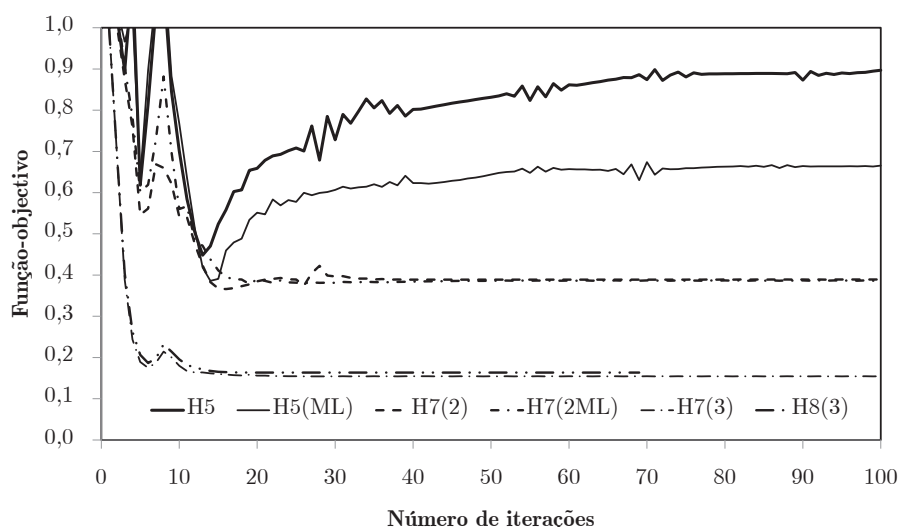


Figura 11.36: Evolução da função-objectivo na resolução de um problema de viga encastrada, com flexão e torção, como carregamento simultâneo ou multicarregamento (ML), utilizando as metodologias H5, H7 e H8 (1, 2 e 3 regiões).

soluções mostram-se adequadas no tipo de resposta que indiciam. Além disso, permitem mais uma vez comparar o comportamento das metodologias H7 e H8. O caso H7 resulta numa resposta ligeiramente melhor pela variação de densidade global (e correspondentes fracções volúmicas locais), mas esta é compensada pela estabilidade e melhor definição das respostas obtidas com a metodologia H8.

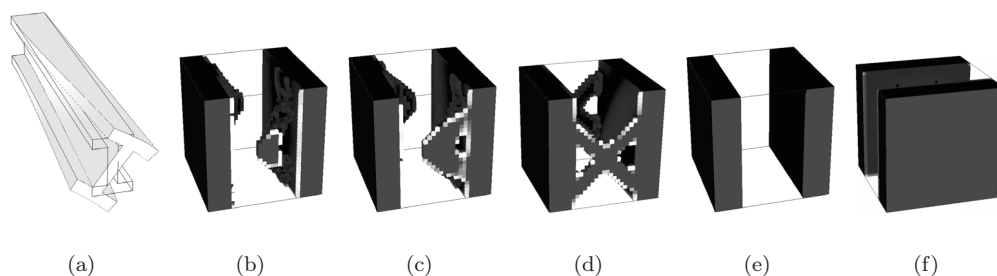
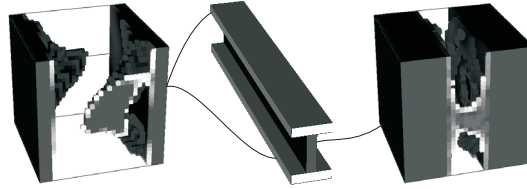


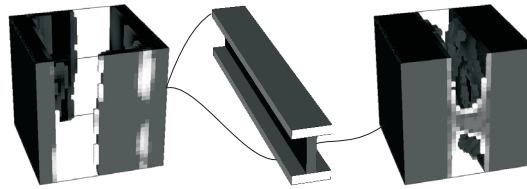
Figura 11.37: Topologias óptimas locais do problema de viga encastrada segundo uma metodologia H5: (a) referência de orientação, (b) carregamento simultâneo, (c) solução intermédia no problema de carregamento simultâneo, (d) carregamento múltiplo com pesos idênticos, e solução isolada dos problemas de (e) flexão e (f) torção.

Apresenta-se ainda a optimização do material a utilizar no suporte de um perfil alar usado para gerar apoio aerodinâmico num automóvel de competição [DTM 2012], tal como ilustrado na figura 11.39. Utiliza-se uma geometria aproximada, ilustrada na figura 11.40 juntamente com as condições de fronteira adoptadas e uma alternativa de divisão em dois subdomínios. Os carregamentos impostos correspondem a uma força vertical, acompanhada de uma componente longitudinal de arrasto e uma componente transversal de magnitude reduzida.

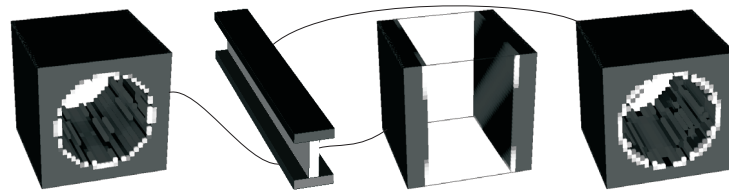
Na figura 11.41 mostra-se a evolução da função-objectivo para três abordagens utilizadas na re-



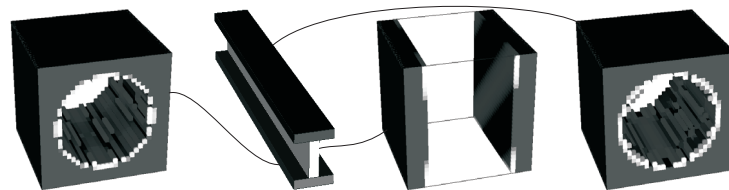
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 11.38: Topologias ótimas locais do problema de viga encastrada segundo metodologias multiescala de subdomínios: (a) H7 com duas regiões, (b) H7 com duas regiões e multicarregamento, (c) H7 com três regiões e (d) H8 com três regiões.

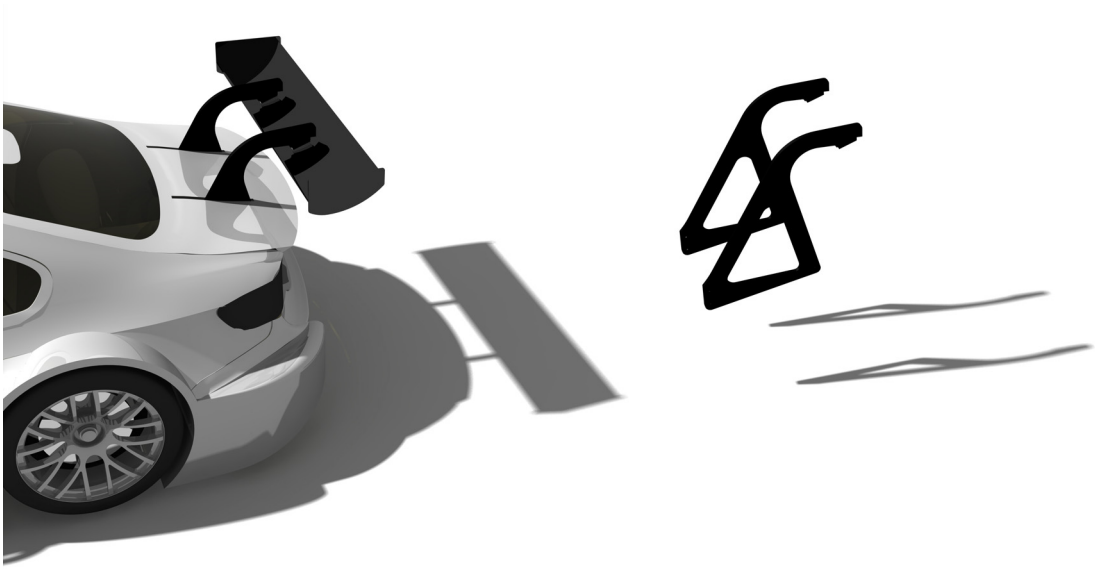


Figura 11.39: Representação de um suporte de aerofólio traseiro num automóvel de competição.

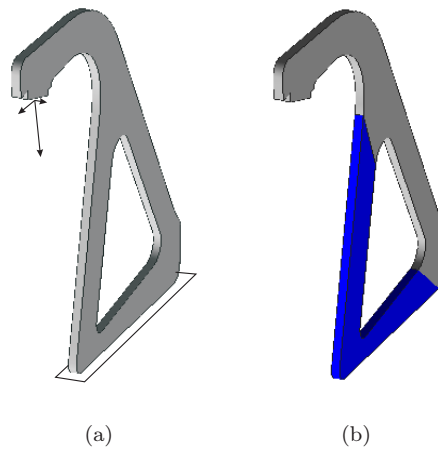


Figura 11.40: Representação (a) de geometria e condições de fronteira de um problema de otimização de um suporte de aerofólio de um automóvel de competição, assim como de (b) uma divisão em duas regiões.

solução do problema, com os modos H5, H6<sup>1</sup> e H8, neste caso com 2 subdomínios. Neste problema, ao contrário do anterior, verifica-se que a evolução obtida corresponde a respostas rápidas e estáveis dos problemas, com soluções que permitem uma acentuada minimização do objectivo. As soluções obtidas estabilizam rapidamente e sem deterioração posterior dos resultados, constatando-se que o comportamento geral das metodologias utilizadas depende fortemente da natureza do problema resolvido. Na figura 11.42 ilustram-se as topologias obtidas na resolução deste problema segundo as

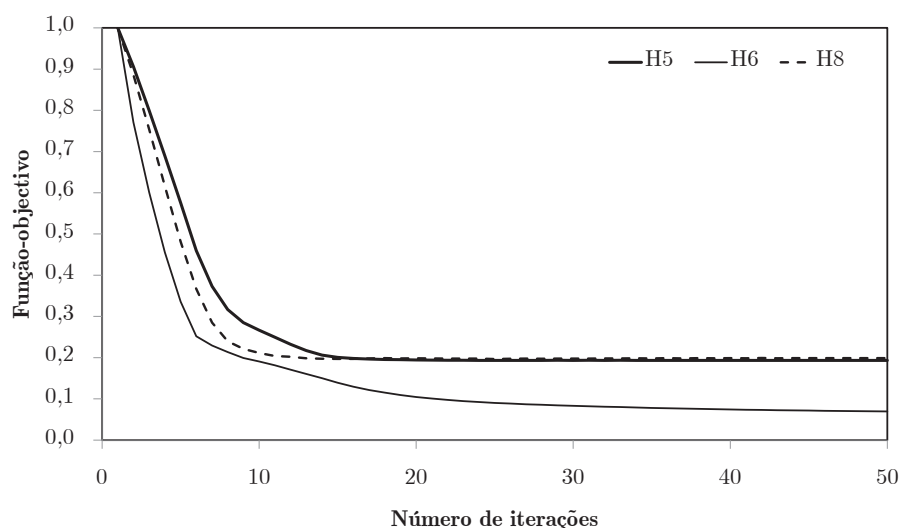


Figura 11.41: Evolução da função-objectivo na resolução de um problema de suporte de aerofólio de automóvel de competição, utilizando as metodologias H5, H6 e H8 (duas regiões).

referidas metodologias. A distribuição dominante volta a ser o laminado observado anteriormente. Mais uma vez, surgem estruturas secundárias para fazer a ligação entre os planos do laminado e manterem uma estrutura conexa entre fases constituintes. Estas estruturas são menos importantes quando as propriedades destas fases se aproximam (*vd.* Fig. 11.42(d)), tendendo-se novamente para um laminado mais simples. Atente-se ainda à resposta do domínio vertical na resolução com a estratégia H8, onde a microestrutura óptima obtida é coerente com os esforços predominantemente longitudinais observados nesta região. Por sua vez, a optimização multiescala desacoplada (H6), apesar das reservas descritas anteriormente, conduz a resultados válidos. No entanto, a evolução da optimização microestrutural mostrou-se mais lenta que a macroestrutural, tendendo para manter algumas densidades intermédias residuais.

Em termos de aplicação das metodologias desenvolvidas em problemas 3-D, os resultados obtidos apresentam-se coerentes com o observado para problemas 2-D. No entanto, a maior complexidade associada a esses problemas, assim como a sua dimensão, leva a que sejam necessários estudos mais aprofundados para afinar correctamente o seu desempenho.

<sup>1</sup>No exemplo aqui ilustrado, utilizou-se na estratégia H6 uma fracção volúmica macroestrutural de  $f_v = 0,7$  e microestrutural de  $f_v = 0,5$ .

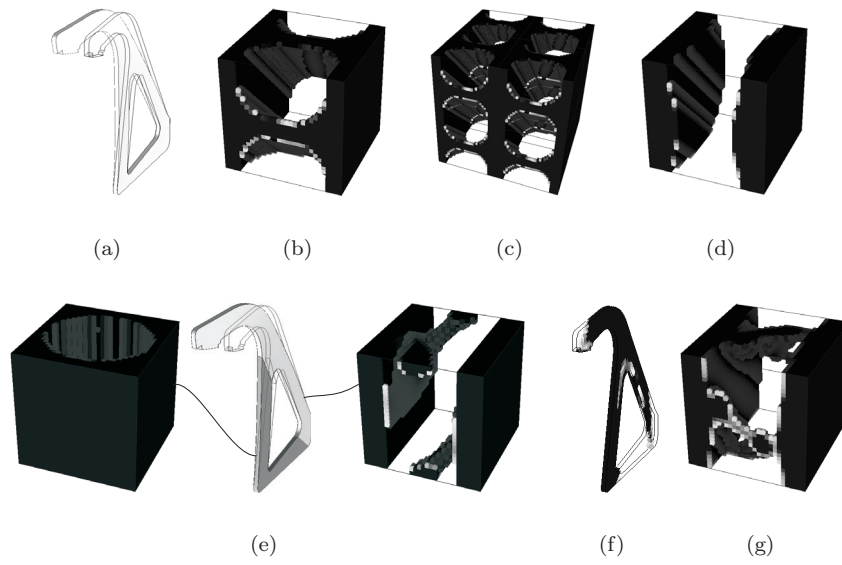


Figura 11.42: Topologias óptimas obtidas para um suporte de aerofólio de automóvel de competição: (a) referência de orientação, (b) H5, (c) periodicidade H5, (d) H5 com  $d_m = 0,05$ , (e) H8 com duas regiões e topologias H6 (f) macro- e (g) microestrutural.

## Capítulo 12

# Considerações Finais

*Resumem-se as conclusões gerais obtidas ao longo do trabalho.  
Tecem-se algumas considerações gerais acerca do trabalho realizado e  
estabelecem-se previsões de potencial desenvolvimento futuro.*

---

O trabalho descrito neste documento centrou-se no desenvolvimento de metodologias de simulação numérica e optimização topológica, e na sua implementação para a construção de ferramentas computacionais. O programa desenvolvido, de acordo com os objectivos propostos, permite a resolução de uma grande variedade de problemas, de forma dinâmica e flexível. O desenvolvimento de *software* foi acompanhado por trabalho ao nível do *hardware* na forma de um *cluster* do tipo Beowulf, montado e configurado no âmbito do mesmo trabalho. Nas secções seguintes tecem-se algumas considerações gerais, resumindo as conclusões do trabalho e fazendo uma apreciação sobre o seu desenvolvimento e futuro.

### 12.1 Conclusões

Os resultados apresentados destinam-se, por um lado, a ilustrar o desempenho do programa desenvolvido. Por outro lado, têm também por objectivo compreender o funcionamento das várias metodologias de optimização topológica em análise, especialmente das estratégias multiescala e, em particular, das abordagens alternativas aqui apresentadas. De acordo com a estrutura geral deste documento, as conclusões resumem-se numa sequência idêntica ao apresentado nos capítulos de resultados.

#### 12.1.1 Homogeneização por Expansão Assimptótica

Atendendo à grande importância da Homogeneização por Expansão Assimptótica (HEA) no trabalho desenvolvido, fizeram-se alguns ensaios para a avaliação dos seus resultados. Estes incluíram avaliações de propriedades constitutivas com diferentes tipos de Células Representativas Unitárias (CRU), bi- (2-D) e tridimensionais (3-D). Estas foram comparadas com outras técnicas de previsão de propriedades equivalentes, numéricas e analíticas.

Com a HEA é possível extrair tensores constitutivos e, por sua vez, propriedades equivalentes em problemas de termoelasticidade e condução de calor. Constata-se uma reduzida dependência das propriedades homogeneizadas obtidas face ao grau de refinamento de malha. Em termos de

grau de confiança dos resultados esta é uma importante constatação, visto que, por questões de custo de processamento, as malhas de elementos finitos utilizadas nos procedimentos de optimização topológica multiescala apresentados neste trabalho tendem a ser pouco refinadas.

Observa-se também uma elevada coerência entre os resultados obtidos e os diferentes valores de referência. As diferenças mais relevantes surgiram em alguns casos 2-D, essencialmente devido ao facto de se ter optado por análises em estado plano de tensão por uma questão de coerência com a utilização habitual em optimização topológica. Nestes casos, ao analisar materiais compósitos de fibras contínuas unidireccionais, verifica-se que seria mais adequado recorrer a estado plano de deformação para aproximar os resultados 3-D.

Demonstra-se também a flexibilidade dos procedimentos desenvolvidos, não só com o recurso a diferentes tipos de elementos finitos mas também a CRU de geometrias alternativas. Neste aspecto, mostram-se bons resultados utilizando CRU paralelepipedicas e rectangulares, assim como na aplicabilidade das metodologias desenvolvidas a CRU de geometria hexagonal. Refira-se que em qualquer dos casos os diversos correctores são claramente representativos da heterogeneidade do material. Esta afirmação é particularmente relevante no que diz respeito ao enquadramento em estratégias de optimização local, já que vão ser responsáveis pelas sensibilidades ao nível da microescala.

### 12.1.2 Optimização Topológica

Ao desenvolver o código que está na origem dos resultados aqui apresentados, foi perceptível a grande quantidade de aspectos relevantes no seu desempenho. Em particular, os módulos de optimização topológica são condicionados por diversos parâmetros e procedimentos cujo funcionamento e influência deveriam ser analisados. Este aspecto torna-se ainda mais relevante ao considerar o facto de a estrutura modular do programa desenvolvido acarretar uma interdependência acentuada entre diferentes módulos de cálculo. Assim, ao nível da optimização topológica, começou-se por realizar um conjunto de estudos com vista a compreender o comportamento geral do programa antes de aprofundar procedimentos mais específicos. No geral, pela sua dimensão e pelo facto de muitos aspectos de tornarem mais perceptíveis, nomeadamente ao nível do pós-processamento, optou-se por realizar análises 2-D, apresentando exemplos 3-D sempre que se julgou conveniente.

Na resolução de problemas de optimização topológica, em termos gerais, verifica-se uma correcta convergência dos processos iterativos. Além disso, demonstram-se bons resultados em termos de objectivos efectivos e topologias obtidas por comparação com a bibliografia. Observam-se, no entanto, como esperado, problemas de instabilidade numérica, nomeadamente ao nível da existência de fenómenos *checkerboard* ou de dependência de malha. Uma das soluções para alguns destes problemas passa pela utilização de filtros de sensibilidades ou de densidades. Desenvolveram-se diferentes estratégias de modo a controlar estes fenómenos. Neste aspecto, mostra-se ainda que utilização de elementos quadráticos se apresenta como uma boa opção para controlar algumas destas instabilidades.

Utilizaram-se diferentes métodos de resolução, segundo critérios de óptimo (OC) e variações do Método das Assíptotas Móveis (MMA), todos com bons resultados. Verifica-se que o MMA permitia, controlando a actualização das assíptotas móveis, a manipulação da sua actuação entre actualizações mais ou menos agressivas das variáveis de optimização, assim como a adaptação para funcionar como o método CONLIN. Foi ainda alterado de modo a permitir a manipulação activa desta actualização.

De entre os vários aspectos cuja influência foi testada, destaca-se a utilização de uma versão modificada do SIMP, permitindo o controlo das diferenças de magnitude entre propriedades constituintes. Esta versão da parametrização do problema, actuando sobre o impacto efectivo das densidades calculadas, permite uma aproximação ao comportamento de materiais compósitos, assim como evitar algumas singularidades.

Destaca-se também a abordagem aproximada como uma forma de melhorar o desempenho computacional global dos problemas de optimização. Verifica-se que os métodos de optimização



topológica implementados se mantêm muito estáveis mesmo com tolerâncias bastante relaxadas na resolução dos sistemas de equilíbrio. É possível ter-se erros ao nível do campo de deslocamentos assinaláveis que conduzam a campos de sensibilidade que, em termos formais, se mantêm coerentes. Nestes casos, as topologias obtidas são ainda aceitáveis, facto muito importante na resolução de problemas de grandes dimensões.

A resolução de problemas de termoelasticidade apresentou-se revestida de diversos problemas de estabilidade. As instabilidades surgem essencialmente com a oscilação de sinal das sensibilidades por influência das componentes de dilatação, quebrando a monotonia dos problemas de optimização e tornando os métodos utilizados claramente desadequados. Estes problemas são tanto piores quanto maiores são as variações de temperatura envolvidas, acentuando-se claramente com campos não-constantes de temperatura e especialmente com a imposição de fluxos de calor.

Em contrapartida, os problemas de condução de calor apresentam bons resultados, coerentes com a bibliografia. Por sua vez, a sua conjugação com problemas mecânicos em optimização multiobjectivo mantém esse bom comportamento.

Em termos gerais, constata-se que as conclusões obtidas para os casos 2-D são extrapoláveis para 3-D, apresentando estes os mesmos fenómenos. Os resultados apresentados são coerentes.

### 12.1.3 Optimização Topológica Multiescala

A optimização topológica multiescala é uma parte fulcral deste trabalho. As diferentes estratégias utilizadas, conjugadas com métodos de optimização, parâmetros e diversos outros factores que influenciam a resolução dos problemas deste tipo, levam a que seja necessária uma análise objectiva do comportamento do programa a este nível. Sendo as abordagens multiescala aqui apresentadas fortemente dependentes do comportamento ao nível da optimização microestrutural, começou-se por fazer uma análise da abordagem local e da homogeneização inversa. Posteriormente verificou-se a influência da microestrutura sobre a optimização macroestrutural e, por fim, analisou-se a optimização topológica hierárquica, esta verdadeiramente multiescala. Optou-se por centrar a maioria destes estudos em estratégias clássicas e elasticidade linear, remetendo outros tipos de análise e de estratégias para capítulos subsequentes.

Ao nível da optimização do material constituinte, abordaram-se aqui duas estratégias distintas. A abordagem local da optimização topológica constitui uma adaptação do procedimento geral com condições de fronteira específicas, ao passo que a homogeneização inversa utiliza a HEA como parte integrante do processo de optimização.

Na abordagem local, a utilização das condições de fronteira MFC ao longo de toda a fronteira das CRU dá origem a problemas de condicionamento e estabilidade assinaláveis, especialmente utilizando condições heterogéneas. Estes problemas de condicionamento são uma séria limitação na resolução destes problemas de optimização, levando a que os tempos de resolução dos sistemas de equações cresçam com o aumento da discrepância entre propriedades dos elementos finitos utilizados. No entanto, esta metodologia funciona de forma correcta em 2-D e em 3-D, mas mostra-se demasiado limitativa.

Em contrapartida, a homogeneização inversa apresenta resultados comparáveis aos anteriores nos problemas resolvidos em comum, mas com mais estabilidade e muito maior flexibilidade. A homogeneização inversa apresenta-se como uma técnica que permite não só a optimização de material mas também uma natural integração em diferentes procedimentos multiescala. Muitas das conclusões retiradas dos casos de optimização macroestrutural são extrapoláveis para aqui. No entanto, a periodicidade associada à homogeneização e às sensibilidades resultantes traz algumas especificidades. Destaca-se, nomeadamente, uma tendência usualmente mais reduzida para incorrer em algumas das instabilidades numéricas referidas anteriormente. Um dos aspectos que se torna rapidamente aparente é a tendência para a simplicidade das topologias obtidas, claramente desejada ao trabalhar com materiais compósitos.

Sem filtros de sensibilidade, os processos iterativos de homogeneização inversa tendem a estabilizar muito rapidamente, ao passo que a utilização de técnicas de filtragem acarreta usualmente

uma adaptação mais lenta. Isto é acompanhado pela referida tendência para simplificar soluções, podendo, no entanto, acabar por desligar fases rígidas e deteriorar a resposta do material obtido. Em contrapartida, a utilização de elementos quadráticos na microescala oferece poucas vantagens face ao custo computacional elevado que acarreta.

Denota-se ainda a influência da solução inicial, especialmente ao perceber que um campo de densidades homogêneo inicial conduz a sensibilidades constantes na microescala que precisam de algum tipo de desequilíbrio numérico para redistribuir material. Refira-se também que, mais uma vez, se constata a coerência entre as análises 2-D e 3-D.

Antes de abordar a optimização hierárquica, que actua simultaneamente ao nível da macro e da microescala, fez-se referência à influência da configuração da microescala na optimização macroestrutural. Para o efeito, utilizou-se a HEA como base integrada de cálculo da informação constitutiva utilizada na resolução macroestrutural de optimização topológica. Verifica-se uma clara influência do material utilizado sobre a topologia macroestrutural óptima. Por um lado, esta influência é notória mesmo com diferenças reduzidas entre as propriedades das fases envolvidas. Por outro lado, quanto maior for esta diferença maior é a discrepância entre topologias óptimas obtidas. Isto deve-se ao acentuar do carácter ortotrópico do comportamento do material.

Após os estudos anteriores, analisou-se o comportamento do programa desenvolvido em aplicações de optimização hierárquica. Abordaram-se questões gerais de optimização hierárquica em elasticidade, centradas no comportamento das diferentes estratégias implementadas e questões numéricas mais relevantes. Os modelos hierárquicos analisados foram o H1 e o H3. No modelo H1, as variáveis do problema são exclusivamente as densidades microestruturais. No modelo H3, por sua vez, as densidades macroestruturais são também variáveis independentes, actualizadas ao nível da macroescala de acordo com sensibilidades oriundas das microestruturas correspondentes e constituindo restrições de volume para os problemas locais. Note-se que nas abordagens hierárquicas as topologias macroestruturais apresentam regiões de densidades intermédias. Ao contrário dos casos estritamente macroestruturais, o que se obtém aqui não é uma estrutura aproximadamente discreta, mas uma distribuição local de materiais constituintes. A representação topológica macroestrutural corresponde apenas à tradução macroscópica das fracções volúmicas associadas aos problemas microestruturais.

Verifica-se que a estratégia H1 apresenta resultados aproximados com os vários métodos de optimização, apesar de se verificar que o controlo do processo é de afinação complicada com critérios de óptimo. Os resultados obtidos atingem, mesmo para malhas macroestruturais pouco refinadas, objectivos melhores do que os obtidos para os casos macroestruturais correspondentes. No caso dos métodos H3, observa-se que os valores obtidos para a função-objectivo no ponto óptimo são aproximados aos obtidos com as metodologias H1, especialmente utilizando método CONLIN na resolução dos problemas locais. No entanto, esta metodologia apresenta algumas limitações no que diz respeito à definição de sensibilidades nos casos de densidade macroestrutural extrema, 0 ou 1. A estratégia H1 não apresenta este problema, associado aos multiplicadores de Lagrange locais utilizados como sensibilidades globais na estratégia H3. No caso H1 todas as variáveis são processadas apenas ao nível local e as densidades macroestruturais surgem apenas como variáveis dependentes. Em contrapartida, a estratégia H3 traz algumas vantagens em termos de controlo local de cada problema microestrutural. Os resultados obtidos com o modo de cálculo H1 são globalmente melhores do que os obtidos com H3. Neste caso, destaca-se pela negativa o cálculo com recurso ao método MMA na actualização das variáveis de densidade nos problemas locais. Em termos gerais, constata-se alguma instabilidade na metodologia H3 nesta implementação.

Ao nível da microescala, o recurso a CRU com maior refinamento de malha dá origem a topologias com maior detalhe, mas essencialmente da mesma natureza, conduzindo a propriedades homogeneizadas e sensibilidades locais de onde se obtém resultados muito aproximados. Isto está intimamente ligado à tendência para soluções simples ao nível local. Ainda assim, verifica-se uma ligeira melhoria quando comparados com os resultados equivalentes de células menos refinadas. Note-se ainda que as malhas locais mais grosseiras originam ocasionais falhas de periodicidade. Estas devem-se a dificuldades de representar detalhe suficiente, assim como à margem reduzida

para respeitar o volume previsto. No que diz respeito à macroescala, destaca-se a utilização de elementos quadráticos como uma excelente solução para o controlo de alguns efeitos *checkerboard* observados.

#### 12.1.4 Desempenho em Processamento Paralelo

A dimensão e a complexidade dos problemas de optimização topológica tende a consumir recursos computacionais que se podem tornar proibitivos na resolução de muitos problemas em tempo útil. Apesar da constante evolução ao nível do equipamento informático disponível para os consumidores em geral, o cálculo paralelo é cada vez mais uma constante, mesmo que imperceptível, no quotidiano computacional. Neste trabalho, especialmente atendendo à dimensão de alguns dos problemas de optimização multiescala, este tipo de processamento constitui um ponto de análise relevante. Assim, utilizando para o efeito uma máquina multicomputadores do tipo *cluster* Beowulf desenvolvida no âmbito deste trabalho, e através da paralelização do código desenvolvido segundo um paradigma de memória distribuída, fizeram-se alguns estudos acerca do comportamento do programa segundo estratégias de cálculo paralelo e distribuído.

Uma primeira conclusão a este nível diz respeito ao desempenho do *cluster* TaranTux. Apesar de não serem aqui incluídas análises de desempenho de *hardware*, verifica-se não só no âmbito deste trabalho mas também noutras utilizações que o seu funcionamento corresponde ao esperado, conduzindo a bons resultados em diversas aplicações.

Quanto ao comportamento do programa desenvolvido, a primeira análise fez-se isoladamente ao nível do problema de elementos finitos. Verifica-se a redução dos tempos de computação em cálculo paralelo. Como esperado, a parcela correspondente a tarefas efectuadas maioritariamente em série mantém um *speed-up* em torno da unidade, tendendo mesmo a reduzir ligeiramente devido às tarefas de gestão e dimensionamento adicionais em cálculo paralelo. No extremo oposto do espectro encontra-se a construção do sistema de rigidez. Neste caso, o facto de cada porção do sistema ser construída de forma praticamente independente no processador correspondente aos elementos do domínio que lhe diz respeito traduz-se num processo perfeitamente escalável. Resultados satisfatórios foram também obtidos para a resolução do sistema de equações e, consequentemente, para o desempenho global do problema. Constata-se, no entanto, que a implementação do algoritmo de resolução PARCONG neste programa apresenta resultados claramente inferiores à sua implementação original.

A resolução do problema de elementos finitos corresponde à maior parcela de processamento consumida na optimização topológica. O tempo associado às tarefas de optimização (análise de sensibilidades e função-objectivo, e actualização de variáveis), dependendo das estratégias utilizadas, apresenta usualmente um peso reduzido no processamento do problema. Assim, estas são aqui executadas em série no nó mestre. Estas tarefas mantêm um tempo de computação constante em paralelo, mas, apesar disso, é perceptível a redução gradual do tempo total de processamento com o aumento do número de processadores. As evoluções de desempenho da construção do sistema de equações e da sua resolução são idênticas ao caso geral, ao mesmo tempo que as tarefas executadas em série não apresentam evoluções com o aumento do número de processadores. Por esta razão, o desempenho global mantém-se elevado, mas reduz-se face ao caso geral.

Uma clara alteração surge com a utilização de filtros de sensibilidades, para problemas de grandes dimensões, já que neste trabalho envolvem sempre uma análise exaustiva de toda a malha. Assim, a maior parcela de processamento em tarefas de optimização corresponde, nesta implementação, às operações relacionadas com a aplicação de filtros. Note-se ainda que uma parte considerável do tempo consumido surge na primeira iteração. O desempenho do problema é francamente deteriorado com a utilização de filtros. Optou-se então por paralelizar este procedimento nas tarefas iniciais, já que apresentam a vantagem de poderem ser efectuadas de forma completamente independente, elemento a elemento, tornando-o teoricamente escalável. Isto é verificado nos indicadores de desempenho resultantes, com claras vantagens face à versão em série.

A principal motivação para a inclusão do cálculo paralelo surge com a optimização hierárquica,

como responsável pelos problemas cuja exigência computacional é mais evidente. De facto, nestes processam-se duas escalas em simultâneo, com a resolução de um problema local de homogeneização por expansão assintótica por cada elemento da estrutura global, para além do problema global. Começou-se por uma estratégia inteiramente paralelizada, onde todos os problemas são resolvidos em todos os processadores. Verifica-se neste caso que os tempos de execução oscilam bastante, resultando num péssimo desempenho paralelo. Os problemas de condicionamento dos problemas locais, responsáveis pela quase totalidade dos recursos necessários, são generalizados nesta implementação com sérias instabilidades associadas à distribuição das penalidades utilizadas na imposição de periodicidade. Em conjunto com as variações de rigidez resultantes da optimização topológica, estas instabilidades originam resultados péssimos que invalidam a utilização desta paralelização.

A resposta a este problema surge numa abordagem distribuída. Os problemas locais são distribuídos de modo a serem resolvidos em série, simultaneamente, em diferentes processadores. Neste caso, a decomposição de domínio é feita apenas na macroescala. Os resultados são muito melhores que os anteriores e mais coerentes com o esperado, apesar do desempenho depender da relação entre o número de problemas e o número de processadores disponíveis. Ainda assim, existe uma clara limitação desta implementação nas comunicações efectuadas em cada iteração. Com o facto de se concentrarem algumas operações de optimização no nó mestre, para além da concentração de informação para controlo e pós-processamento, a quantidade de informação trocada entre processadores, relativa aos problemas locais, origina um *bottleneck* de desempenho. Constata-se que este problema é demasiado limitativo em problemas de grão reduzido, pelo que seria justificável alterar a estrutura de cálculo para aumentar a independência dos problemas locais e reduzir as comunicações.

Note-se ainda que a resolução destes problemas com as duas estratégias alternativas, H1 e H3, conduz a indicadores de desempenho virtualmente idênticos. Salienta-se ainda uma questão adicional. Os paradigmas de programação paralela aqui utilizados, de acordo com modelos de memória distribuída, tendem a trazer menos benefícios do que desejado em sistemas de poucos processadores. Adicionalmente, a actual profusão de múltiplas unidades de processamento em computadores pessoais justifica uma revisão desta abordagem, no sentido de modelos de memória partilhada ou mistos.

### 12.1.5 Aplicações Gerais

Para além dos problemas de elasticidade apresentados anteriormente, neste trabalho desenvolveram-se também ferramentas de optimização multiobjectivo, com recurso a problemas adicionais de condução de calor, em optimização multiescala hierárquica. Além disso, este trabalho teve sempre em vista as aplicações de engenharia utilizando materiais compósitos e celulares. As estratégias de optimização multiescala hierárquicas tendem a gerar uma grande variedade de distribuições locais de material que se revelam pouco exequíveis em termos de produção, razão pela qual foram desenvolvidas estratégias alternativas com vista a obter propostas óptimas de distribuição de constituintes que não levassem apenas em conta os efeitos locais mas tentassem de alguma forma capturar os efeitos relevantes no comportamento de toda uma estrutura ou de regiões notáveis da mesma. Neste contexto, depois de validações e análises preliminares, realizaram-se alguns estudos no sentido de avaliar o comportamento do programa segundo estas abordagens alternativas.

Ao nível da optimização multiescala multiobjectivo, verifica-se que a comparação entre objectivos é semelhante ao obtido para o caso de uma escala apenas. No entanto, as variações mostram-se neste caso mais progressivas e estáveis, fruto da actuação ao nível da microescala e da progressiva influência constitutiva sobre o material em cada ponto da macroescala. Este tipo de actualização origina também, apesar de uma discretização macroestrutural bastante menos detalhada, uma minimização mais eficaz graças ao elevado detalhe local dado pela microescala. Mais uma vez, apesar dos problemas locais serem independentes, é perceptível a progressividade das topologias, conduzindo claramente a variações graduais de propriedades coerentes com o detalhe microestru-

tural necessário à resposta. Refira-se ainda que a resolução dos problemas apresentados se mostrou muito estável, em grande medida pela estabilização progressiva das assíntotas móveis do método MMA.

No que diz respeito a estratégias de optimização multiescala, constata-se que o problema geral de optimização hierárquica apresenta algumas limitações em termos de exequibilidade prática das topologias obtidas. No sentido de aproximar este tipo de cálculo de abordagens mais coerentes com a produção efectiva de materiais de engenharia, nomeadamente materiais compósitos e celulares para aplicações estruturais, as estratégias multiescala têm por objectivo controlar o número e a distribuição efectiva de materiais constitutivos. Refira-se, a título geral, que, para além do potencial em termos de exequibilidade construtiva, estas estratégias apresentam vantagens notórias em termos de recursos computacionais face às metodologias hierárquicas convencionais. Por um lado, passa a ser possível a utilização de discretizações macroestruturais refinadas sem se tornar proibitivo em termos de memória e tempo de processamento. Por outro lado, controlando o número de problemas locais a resolver, é possível resolver estes problemas muito mais rapidamente e/ou utilizar malhas locais mais refinadas em busca de detalhe adicional.

Em primeiro lugar, nas abordagens H4 e H5 considera-se apenas uma topologia local para toda a estrutura. Verifica-se que as respostas anisotrópicas apresentadas na microestrutura são coerentes com os tipos de solicitação impostos na macroescala. No entanto, existem algumas limitações em alguns dos problemas resolvidos, já que a média volúmica de grandezas macroestruturais tende por vezes a anular a influência de regiões de maior relevância. O recurso a diferentes ponderações tende a melhorar estes problemas, apesar de ser claramente necessário algum desenvolvimento adicional neste âmbito. Utilizando propriedades dos constituintes próximas, os resultados são bastante melhores. Isto deve-se não só à maior rigidez relativa das fases menos rígidas mas também ao facto de deixarem de ser relevantes questões de fases desconexas. Além disso, tende-se para soluções mais simples e muitas vezes mais coerentes com a produção de materiais compósitos.

Constata-se também que o refinamento da malha da microescala influencia significativamente menos os resultados obtidos do que o refinamento da malha macroestrutural. Verifica-se, no entanto, que a falta de detalhe de malhas locais pouco refinadas influencia negativamente o comportamento geral, com materiais tendencial e ligeiramente menos rígidos. Esta falta de detalhe pode ainda tornar-se mais relevante para casos de microestruturas óptimas mais complexas.

A alternativa de optimização topológica multiescala desacoplada surge como uma tentativa de conciliar a optimização ao nível do material com a obtenção de estruturas óptimas definidas ao nível macroestrutural utilizando campos de variáveis independentes. A resolução de casos-limite, com optimização apenas numa das escalas, revela que esta estratégia conduz exactamente aos mesmos resultados obtidos com as metodologias de optimização correspondentes, ou seja, macroestrutural e H5. Tal traduz-se, assim, num correcto funcionamento do modo H6 assim como na sua flexibilidade. Apesar das situações-limite funcionarem correctamente, assim como os modos intermédios, existem no entanto alguns riscos na utilização desta metodologia. Verifica-se que a influência das duas escalas é coerente, mas é normal uma das escalas tornar-se dominante no processo de convergência, mesmo utilizando actualizações muito lentas. Conclui-se que este modo de optimização permite a optimização simultânea de ambas as escalas, mas exige algum cuidado na sua utilização.

Os modos de optimização H7 e H8 representam uma alternativa na resolução de problemas multiescala, controlando o número de problemas locais da abordagem hierárquica. Utilizam-se procedimentos derivados do modo H5, mas com ponderação de acordo com subdomínios, existindo um problema local por cada região predefinida na macroescala. Pretende-se aqui que se faça a divisão do domínio de forma a procurar o melhor compromisso entre a determinação dos materiais óptimos e o fabrico dos componentes estruturais.

Constata-se nestes casos, mesmo com apenas dois problemas locais e duas CRU, que os resultados obtidos são muito melhores que os anteriores. No entanto, a qualidade dos resultados depende acentuadamente da divisão de domínios efectuada, concluindo-se que este modo de funcionamento requer uma correcta avaliação de engenharia do problema a resolver por forma a definir divisões

coerentes com as solicitações de serviço dos componentes a fabricar. De qualquer forma, um número maior de subdomínios coerentes permite que cada região contribua de melhor forma para o desempenho global da estrutura e tende a melhorar o desempenho.

Observa-se no modo H7 alguma variedade de topologias locais, assim como alguns casos onde se apresentam oscilações sobre densidades intermédias. Estas correspondem a oscilações entre a densidade macroestrutural e a resposta local, tendendo a resultar em algumas regiões de cinzento. No entanto, estas correspondem a oscilações em torno topologias comuns. O modo de funcionamento H8, sem alteração das densidades globais, apresenta-se como menos permeável a este tipo de problema. Neste caso, a densidade mantém-se constante em toda a macroescala apesar da evolução topológica de cada uma das microescalas. Além disso, as topologias obtidas neste modo de funcionamento são mais definidas, e a convergência mais rápida. A resposta geral das estruturas obtidas é ligeiramente pior, mas muito próxima.

No geral, pode concluir-se que as metodologias apresentadas representam uma boa alternativa à optimização hierárquica. Estas revelam-se muito menos onerosas em termos computacionais e conduzem a resultados que permitem uma maior adequação ao fabrico de componentes e estruturas em materiais compósitos e celulares. Em termos de aplicação das metodologias desenvolvidas em problemas 3-D, os resultados obtidos mostram-se mais uma vez coerentes com o observado para problemas 2-D. No entanto, a maior complexidade associada a esses problemas, assim como a sua dimensão, leva a que sejam necessários estudos mais aprofundados para afinar correctamente o seu desempenho.

## 12.2 Perspectivas de Trabalho Futuro

Pretende-se que as ferramentas desenvolvidas no âmbito deste trabalho sejam utilizadas e aperfeiçoadas no futuro, no sentido de constituírem uma contribuição efectiva para a investigação nas áreas abordadas. Neste sentido, tem-se como objectivo investir na sua melhoria e desenvolvimento segundo as vertentes descritas de seguida. Assim, pretende-se que o desenvolvimento futuro do programa contemple:

- A redução das comunicações na optimização topológica hierárquica, passando eventualmente pela paralelização dos métodos de optimização;
- A melhoria da portabilidade do código, essencial para a criação de uma versão para execução em sistema operativo Windows;
- A inclusão de uma variável de orientação microestrutural em conjunção com as abordagens alternativas apresentadas;
- A criação de uma versão OpenMP;
- A introdução de métodos de optimização mais coerentes com problemas não-monótonos como o de termoelasticidade.

Intimamente ligada aos pontos anteriores surge a perspectiva de desenvolvimento de ferramentas complementares:

- Desenvolvimento de um programa de interface, para facilitar a utilização do programa e para o tornar mais *user-friendly*;
- A divisão em módulos independentes de execução isolada, de modo a adequar os diferentes modos de funcionamento a utilizações mais específicas;



## Apêndice A

# Notação, Nomenclatura, Siglas e Acrónimos

### A.1 Conceitos Gerais de Optimização

$\mathbf{0}$	– Matriz nula
$a_i$	– Valor admissível para a variável $x_i$
$\mathbf{d}^{(k)}$	– Direcção de procura na iteração $k$ num algoritmo de gradiente
$D_i$	– Domínio dos valores discretos admissíveis da variável $x_i$
$e_i$	– Escalar de relaxação da restrição $g_i$
$f$	– Função-objectivo
$f(x)$	– Função-objectivo de um problema de optimização
$\mathbf{f}$	– Vector de funções-objectivo
$\mathbf{f}^\circ$	– Ponto ideal ou utópico do vector de funções-objectivo $\mathbf{f}$
$F$	– Função transformada/função-objectivo composta
$g(x)$	– Restrição de um problema de optimização
$\mathbf{H}$	– Matriz hessiana
$\mathbf{I}_k$	– Conjunto de índices de restrições
$k$	– Índice de iteração
$\mathcal{L}$	– Lagrangiano de um problema de optimização
$m$	– Número total de restrições
$n_d$	– Número de variáveis discretas
$p$	– Número de restrições de igualdade
$P$	– Penalidade em métodos de transformação
$q_i$	– Número de valores admissíveis para a variável $x_i$
$R$	– Domínio admissível de variáveis de optimização
$\mathbf{x}$	– Vector de variáveis de optimização
$\mathbf{x}^*$	– Vector solução (ótimo) de variáveis de optimização
$\alpha$	– Escalar de normalização de uma função-objectivo
$\alpha_k$	– Dimensão do passo da actualização $k$ num algoritmo de gradiente
$\beta$	– Escalar de normalização de uma restrição
$\delta$	– Raio de vizinhança do ponto ótimo $\mathbf{x}^*$
$\Delta_i$	– Limite móvel para a variação da variável $x_i$

$\varepsilon$	–	Escalar utilizado para classificar desigualdades como aproximadamente activas
$\lambda$	–	Multiplicador de Lagrange
$\boldsymbol{\lambda}$	–	Vector de multiplicadores de Lagrange

## A.2 Conceitos Gerais de Cálculo Paralelo

$e_p$	–	Eficiência do cálculo paralelo
$f$	–	Fracção intrinsecamente sequencial, <i>i.e.</i> não-paralelizável, de um programa
$n_p$	–	Número de processadores
$S_e$	–	<i>Speed-up</i> escalado
$S_p$	–	<i>Speed-up</i>
$t_s$	–	Tempo de execução de um algoritmo sequencial
$t_p$	–	Tempo de execução de um algoritmo paralelo

## A.3 Termoelasticidade Linear

$\mathbf{0}$	–	Tensor nulo
$\mathbf{B}$	–	Matriz global das derivadas parciais das funções de forma para o problema mecânico
$\mathbf{D}$	–	Tensor de elasticidade
$\mathbf{f}$	–	Vector de solicitações mecânicas
$\mathbf{F}$	–	Vector de forças externas
$\mathbf{F}_f$	–	Vector de forças distribuídas no volume $\Omega$
$\mathbf{F}_N$	–	Vector de forças distribuídas na superfície $\Gamma_{N_u}$
$\mathbf{F}_T$	–	Vector de forças de dilatação térmica
$\mathbf{k}$	–	Tensor de condutividade térmica / Matriz de rigidez térmica local
$\mathbf{K}$	–	Matriz de rigidez térmica
$\mathbf{K}_k$	–	Matriz de condutividade térmica
$\mathbf{K}_u$	–	Matriz de rigidez
$\tilde{\mathbf{M}}$	–	Matriz global das derivadas parciais das funções de forma para o problema térmico
$n_q$	–	Número de fluxos prescritos
$n_r$	–	Número de forças prescritas
$\mathbf{n}$	–	Versor normal exterior a $\Gamma$
$\mathbf{N}$	–	Matriz global de funções de forma no domínio $\Omega$ para o problema mecânico
$\tilde{\mathbf{N}}$	–	Matriz global de funções de forma no domínio $\Omega$ para o problema térmico
$\mathbf{N}_\Gamma$	–	Matriz global de funções de forma na superfície $\Gamma$ para o problema mecânico



$\tilde{\mathbf{N}}_\Gamma$	– Matriz global de funções de forma na superfície $\Gamma$ para o problema térmico
$\bar{\mathbf{P}}_N$	– Vector de fluxos pontuais prescritos
$\bar{q}$	– Fluxo superficial imposto de calor por condução
$\mathbf{q}$	– Vector de fluxos superficiais, por unidade de área, de calor por condução
$\mathbf{q}_N$	– Vector de fluxos de calor distribuídos no volume $\Omega$
$\mathbf{q}_{PN}$	– Vector de fluxos pontuais
$Q$	– Taxa temporal de geração de calor por unidade de volume
$\mathbf{Q}$	– Vector dos termos de geração de calor
$\mathbf{R}_N$	– Vector de forças pontuais
$\bar{\mathbf{R}}_N$	– Forças pontuais prescritas
$\bar{t}$	– Força superficial na superfície $\Gamma_{N_u}$
$T$	– Temperatura
$\bar{T}$	– Temperatura prescrita
$\mathbf{T}$	– Vector de temperaturas
$\mathbf{u}$	– Vector de deslocamentos
$\bar{\mathbf{u}}$	– Vector de deslocamentos prescritos na superfície $\Gamma_{D_u}$
$\mathbf{U}$	– Vector dos deslocamentos nodais
$\mathbf{x}$	– Vector de coordenadas de um ponto genérico
$\boldsymbol{\alpha}$	– Tensor de expansibilidade térmica
$\boldsymbol{\beta}$	– Tensor dos módulos térmicos
$\Gamma$	– Fronteira do domínio sólido $\Omega$
$\Gamma_{D_T}$	– Superfície de fronteira correspondente às condições de fronteira de Dirichlet associadas ao problema térmico
$\Gamma_{D_u}$	– Superfície de fronteira correspondente às condições de fronteira de Dirichlet associadas ao problema mecânico
$\Gamma_{N_T}$	– Superfície de fronteira correspondente às condições de fronteira de Neumann associadas ao problema térmico
$\Gamma_{N_u}$	– Superfície de fronteira correspondente às condições de fronteira de Neumann associadas ao problema mecânico
$\delta\mathbf{T}$	– Campo discretizado de temperaturas virtuais
$\delta\mathbf{U}$	– Campo discretizado de deslocamentos virtuais
$\boldsymbol{\varepsilon}$	– Tensor de deformações
$\boldsymbol{\sigma}$	– Tensor de tensões
$\Omega$	– Conjunto aberto ocupado pelo meio sólido delimitado pela fronteira $\Gamma$

## A.4 Optimização Topológica

$\mathbf{0}$	– Vector nulo
$b_i$	– Força externa por unidade de volume
$b^l$	– Força externa por unidade de volume para o carregamento $l$
$d_m$	– Factor de relação entre as propriedades de dois materiais constituintes
$D_{ijkl}$	– Componentes do tensor de elasticidade
$\mathbf{D}$	– Matriz constitutiva de elasticidade

$\mathbf{D}_0$	– Matriz de elasticidade do material de base
$\mathbf{D}_e$	– Matriz constitutiva de elasticidade local do elemento $e$
$\mathbf{D}_{\text{adm}}$	– Conjunto de matrizes de elasticidade admissíveis
$f$	– Função-objectivo
$f_0$	– Função-objectivo do problema $Q$ na definição do MMA
$f_i$	– Restrição $i$ do problema $Q$ na definição do MMA
$f_i^{(k)}$	– Função de aproximação do problema $Q$ na definição do MMA
$f_m$	– Função-objectivo do problema mecânico
$f_m^0$	– Termo de normalização da função-objectivo do problema mecânico
$f_t$	– Função-objectivo do problema térmico
$f_t^0$	– Termo de normalização da função-objectivo do problema térmico
$f_v$	– Fracção volúmica de material
$\mathbf{f}$	– Vector de carregamentos mecânicos
$\mathbf{F}$	– Vector de carregamentos global
$\mathbf{F}_t^e$	– Solicitações mecânicas de origem térmica no elemento $e$
$\mathbf{F}_{t0}^e$	– Grandeza auxiliar de solicitação mecânica de origem térmica sobre o material de base do elemento $e$
$\mathbf{F}_p$	– Carregamentos prescritos
$\mathbf{F}_t$	– Solicitações mecânicas de origem térmica
$g_j$	– Restrição $j$
$\mathbf{g}$	– Vector de restrições
$h$	– Dimensão característica da malha de elementos finitos
$\hat{H}_i$	– Peso de ponderação ou operador de convolução do elemento $i$ em técnicas de filtragem
$k_{ij}$	– Componentes do tensor de condutividade térmica
$\mathbf{k}_0$	– Matriz de rigidez local do material de base
$\mathbf{k}_T$	– Matriz de condutividade térmica
$\mathbf{k}_{T\text{adm}}$	– Conjunto de matrizes de condutividade térmica admissíveis
$K$	– Propriedade geral de um material
$K_0$	– Propriedade de um material de base
$K_1, K_2$	– Propriedade de um material constituinte de base
$K_{\min}$	– Valor mínimo para uma dada propriedade de um material
$\mathbf{K}$	– Matriz global de rigidez
$\mathbf{K}_T$	– Matriz de rigidez térmica
$l$	– Índice de carregamento múltiplo
$L$	– Número de carregamentos múltiplos
$L_j^{(k)}$	– Assíntota móvel inferior da variável $x_j$ no MMA
$m$	– Número de restrições
$N_e$	– Conjunto de elementos cujos centros estão a menos de uma dada distância do centro do elemento $e$
$p$	– Número de restrições de igualdade / Penalidade da lei de potência SIMP
$p_{ij}^{(k)}$	– Parâmetro de definição de funções de aproximação do problema $Q$ na definição do MMA
$P$	– Energia potencial total de um sistema / Perímetro
$P^*$	– Limite superior de perímetro
$q$	– Escalar positivo de penalização de perímetro

---

$\bar{q}$	– Fluxos de calor impostos
$q_{ij}^{(k)}$	– Parâmetro de definição de funções de aproximação do problema $Q$ na definição do MMA
$\mathbf{q}$	– Vector de fluxos superficiais de calor
$Q$	– Problema genérico de optimização na definição do MMA
$r_i^{(k)}$	– Parâmetro de definição de funções de aproximação do problema $Q$ na definição do MMA
$R_f$	– Raio do filtro de sensibilidades ou de densidades
$S$	– Função energia de deformação
$\bar{t}_i$	– Força externa por unidade de área
$\bar{t}^l$	– Força externa por unidade de área para o carregamento $l$
$T$	– Campo de temperatura
$u_i$	– Componentes do campo de deslocamentos
$u^l$	– Deslocamentos para o carregamento $l$
$\mathbf{u}$	– Campo de deslocamentos
$\mathbf{u}_e$	– Campo de deslocamentos
$U_j^{(k)}$	– Assíntota móvel superior da variável $x_j$ no MMA
$\mathbf{U}$	– Vector de deslocamentos global
$v_e$	– Volume do elemento finito $e$
$v_i$	– Volume do elemento finito $i$
$V_\Omega$	– Volume do domínio $\Omega$
$w_i$	– Peso de ponderação ou operador de convolução do elemento $i$ em técnicas de filtragem
$w_l$	– Peso de ponderação em optimização de carregamentos múltiplos
$w_m$	– Peso do problema mecânico em optimização multiobjectivo
$w_t$	– Peso do problema térmico em optimização multiobjectivo
$W$	– Trabalho das forças externas ( <i>compliance</i> )
$\mathbf{x}$	– Vector de coordenadas de um ponto genérico
$\mathbf{x}^*$	– Ponto de óptimo
$\boldsymbol{\alpha}$	– Tensor de expansibilidade térmica
$\boldsymbol{\beta}$	– Tensor dos módulos térmicos
$\Gamma$	– Superfície de fronteira de um sólido tridimensional genérico
$\gamma$	– Parâmetro de controlo do tamanho do passo da iteração num esquema de actualização de ponto fixo
$\Gamma_e$	– Fronteira do elemento $e$
$\Gamma_{N_u}$	– Superfície de fronteira correspondente às condições de fronteira de Neumann associadas ao problema mecânico
$\varepsilon_{ij}$	– Componentes do campo de deformações
$\lambda_j$	– Multiplicador de Lagrange associado à restrição $j$
$\boldsymbol{\lambda}$	– Vector de multiplicadores de Lagrange
$\boldsymbol{\lambda}^*$	– Vector de multiplicadores de Lagrange no ponto de óptimo
$\rho$	– Densidade num problema de optimização topológica
$\hat{\rho}$	– Densidade modificada por acção de filtragem de densidades
$\langle \rho \rangle$	– Variação da densidade na transição entre elementos que partilham uma mesma fronteira
$\rho_e$	– Densidade do elemento finito $e$
$\hat{\rho}_e$	– Densidade do elemento $e$ modificada por acção de filtragem de densidades

---

$\rho_i$	–	Densidade do elemento finito $i$
$\rho_{\min}$	–	Densidade mínima
$\varsigma$	–	Escalar positivo utilizado para garantir a diferenciabilidade do perímetro
$\sigma_d$	–	Variância da curva de dispersão em filtragem com função de distribuição gaussiana
$\Omega$	–	Sólido tridimensional genérico

## A.5 Homogeneização e Optimização Multiescala

$\mathbf{b}$	–	Vector de forças externas por unidade de volume
$c$	–	Parâmetro de penalidade do lagrangiano aumentado
$D^0$	–	Tensor de elasticidade do material base
$D_{ijkl}$	–	Componentes do tensor de elasticidade
$D_{ijkl}^h$	–	Componentes do tensor homogeneizado de elasticidade
$D_{ijkl}^\epsilon$	–	Componentes do tensor de elasticidade no sistema de coordenadas da macroescala
$\langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle$	–	Componentes de um tensor de elasticidade homogeneizado médio, resultante de uma topologia microestrutural óptima
$\mathbf{D}$	–	Matriz de elasticidade
$\mathbf{D}^0$	–	Matriz de elasticidade do material de base
$e_x$	–	Elemento finito macroestrutural
$e_y$	–	Elemento finito microestrutural
$f_m$	–	Função-objectivo do problema mecânico
$f_m^0$	–	Termo de normalização da função-objectivo do problema mecânico
$f_t$	–	Função-objectivo do problema térmico
$f_t^0$	–	Termo de normalização da função-objectivo do problema térmico
$\mathbf{f}$	–	Vector de carregamentos nodais
$h_c$	–	Coefficiente de convecção
$\mathbf{I}_j^k$	–	Componentes do tensor identidade de segunda ordem num referencial cartesiano ortonormado
$k_{ij}$	–	Componentes do tensor de condutividade térmica
$k_{ij}^h$	–	Componentes do tensor homogeneizado de condutividade térmica
$k_{ij}^\epsilon$	–	Componentes do tensor de condutividade térmica no sistema de coordenadas da macroescala
$\mathbf{k}$	–	Tensor de condutividade térmica
$\mathbf{K}$	–	Matriz de rigidez
$l$	–	Índice de carregamento múltiplo
$L$	–	Número de carregamentos múltiplos
$\mathcal{L}$	–	Função lagrangiano aumentado
$n_i$	–	Componentes de um versor normal exterior às superfícies $\Gamma_{N_T}$ ou $\Gamma_{R_T}$
$n_j$	–	Componentes de um versor normal exterior à superfície $\Gamma_{N_u}$
$p$	–	Penalidade da lei de potência SIMP
$P$	–	Energia potencial total de um sistema
$q^\epsilon$	–	Campo de fluxos superficiais de calor no domínio macroestrutural

---

$\bar{q}$	– Fluxo prescrito de calor por condução por unidade área
$q_i^{(1)}$	– Campo microestrutural de fluxos superficiais de calor por condução considerando aproximações de primeira ordem
$Q$	– Taxa temporal de geração de calor por unidade de volume
$S$	– Função energia de deformação
$t$	– Índice de iteração
$\bar{t}_i$	– Valor prescrito de força por unidade de área
$\bar{\mathbf{t}}$	– Vector de forças externas por unidade de área
$T$	– Campo de temperaturas
$\bar{T}$	– Temperatura prescrita
$T_0$	– Temperatura de referência
$T'_i$	– Gradientes térmicos macroestruturais
$T_i^{(0)}$	– Temperatura global do material homogeneizado associado à macroescala
$T_i^{(1)}$	– Corrector de primeira ordem do campo de temperaturas
$T_i^{(2)}$	– Corrector de segunda ordem do campo de temperaturas
$T^\epsilon$	– Campo de temperaturas no sistema de coordenadas da macroescala
$T_\infty$	– Temperatura do meio ambiente
$\mathbf{T}$	– Campo de temperaturas
$\bar{\mathbf{T}}'$	– Campo imposto de gradiente térmico macroestrutural
$u^\epsilon$	– Componentes do campo de deslocamentos no sistema de coordenadas da macroescala
$\bar{u}_i$	– Deslocamentos prescritos
$u_i^{(0)}$	– Deslocamento global do material homogeneizado associado à macroescala
$u_i^{(1)}$	– Corrector de primeira ordem do campo de deslocamentos
$u_i^{(2)}$	– Corrector de segunda ordem do campo de deslocamentos
$\mathbf{u}$	– Vector de deslocamentos / Vector de deslocamentos nodais
$\tilde{\mathbf{u}}$	– Campo de deslocamentos que é solução do problema de equilíbrio global
$V$	– Volume de material previsto num problema de optimização topológica
$V_m$	– Volume de material microestrutural previsto num problema de optimização topológica multiescala desacoplada
$V_M$	– Volume de material macroestrutural previsto num problema de optimização topológica multiescala desacoplada
$V_\Omega^0$	– Conjunto das funções contínuas suficientemente regulares, nulas em $\Gamma_{D_T}$ ou $\Gamma_{D_u}$
$w_l$	– Peso de ponderação em optimização de carregamentos múltiplos
$w_m$	– Peso do problema mecânico em optimização multiobjectivo
$w_t$	– Peso do problema térmico em optimização multiobjectivo
$W$	– Trabalho das forças externas ( <i>compliance</i> )
$\mathbf{x}$	– Variável do domínio da macroescala
$\tilde{\mathbf{x}}$	– Vector de coordenadas de um ponto genérico do domínio de solução macroestrutural
$\mathbf{y}$	– Variável do domínio da microescala
$Y$	– Domínio da microescala
$\langle \cdot \rangle_Y$	– Valor médio de uma função Y-periódica em Y
$\alpha_{ij}$	– Componentes do tensor de expansibilidade térmica

---

$\alpha_{ij}^\epsilon$	–	Componentes do tensor de expansibilidade térmica no sistema de coordenadas da macroescala
$\beta_{ij}$	–	Componentes do tensor dos módulos térmicos
$\beta_{ij}^h$	–	Componentes do tensor homogeneizado dos módulos térmicos
$\langle \beta_{ij}^h(\mu) \rangle$	–	Componentes de um tensor dos módulos térmicos homogeneizado médio, resultante de uma microescala ótima
$\Gamma$	–	Fronteira de $\Omega$
$\Gamma_{D_T}$	–	Superfície com condições de fronteira de Dirichlet associadas ao problema térmico
$\Gamma_{N_T}$	–	Superfície com condições de fronteira de Neumann associadas ao problema térmico
$\Gamma_{R_T}$	–	Superfície com condições de fronteira de Robin associadas ao problema térmico
$\Gamma_{D_u}$	–	Superfície com condições de fronteira de Dirichlet associadas ao problema termomecânico
$\Gamma_{N_u}$	–	Superfície com condições de fronteira de Neumann associadas ao problema termomecânico
$\bar{\Delta T}$	–	Campo imposto de variação de temperatura macroestrutural
$\bar{\epsilon}$	–	Campos imposto de deformação macroestrutural
$\epsilon_{ij}$	–	Componentes do tensor das deformações
$\epsilon_{ij}^{(1)}$	–	Campo microestrutural de deformações considerando aproximações de primeira ordem
$\epsilon_{ij}^\epsilon$	–	Componentes do campo de deformações na macroescala
$\epsilon$	–	Tensor / Matriz das deformações
$\epsilon$	–	Relação entre as dimensões características dos domínios da micro- da macroestrutura ou índice superior de $\epsilon Y$ -periodicidade
$\Theta$	–	Função análoga à função densidade de energia de deformação, utilizada na definição local do problema térmico
$\lambda$	–	Multiplicador de Lagrange associado à restrição de volume local
$\Lambda$	–	Multiplicador de Lagrange associado à restrição global de volume
$\mu$	–	Densidade macroestrutural num problema de optimização topológica
$\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$	–	Densidade macroestrutural num problema de optimização topológica, como função da macro- e da microescala
$\Phi$	–	Função de densidade de energia ótima (problema local)
$\bar{\Phi}$	–	Função de energia de deformação ótima (problema local de um dado subdomínio)
$\rho$	–	Densidade macroestrutural num problema de optimização topológica
$\bar{\rho}$	–	Densidade macroestrutural imposta
$\sigma_{ij}$	–	Componentes do tensor das tensões
$\sigma_{ij}^{(1)}$	–	Campo microestrutural de tensões considerando aproximações de primeira ordem
$\sigma_{ij}^\epsilon$	–	Componentes do campo de tensões na macroescala
$\Sigma_{ij}$	–	Componentes do campo macroestrutural homogeneizado de tensões
$\Upsilon^k$	–	Componentes $Y$ -periódicas do vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos
$\Upsilon$	–	Vector do campo de deslocamentos termocaracterísticos de primeira ordem

$\Xi_i$	– Componentes do campo macroestrutural homogeneizado de fluxos superficiais de calor por condução
$\chi_k^{mn}$	– Componentes Y-periódicas do tensor do campo de deslocamentos característicos
$\chi$	– Tensor do campo de deslocamentos característicos de primeira ordem
$\Psi_k$	– Componentes Y-periódicas do vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
$\Psi$	– Vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
$\Omega$	– Domínio da macroescala
$\Omega^h$	– Domínio da macroescala associado a um material homogéneo

## A.6 Programa mainFRAN

<b>0</b>	– Tensor nulo
<b>A</b>	– Matriz de coeficientes
<b>b</b>	– Vector de coeficientes independentes de um sistema de equações
<b>B</b>	– Matriz global das derivadas parciais das funções de forma, para o campo de deslocamentos
$B_e$	– Função de controlo de esquema de ponto fixo num método de critério de óptimo
$c$	– Escalar
<b>c</b>	– Vector de escalares / Vector de incógnitas do sistema de equações preconditionado
<b>d</b>	– Vector de coeficientes independentes do sistema de equações preconditionado
<b>D<sup>h</sup></b>	– Matriz de elasticidade homogeneizada
$e_x$	– Elemento macroestrutural
$e_y$	– Elemento microestrutural
<b>e</b>	– Erro associado à resolução de um sistema de equações
$f$	– Função objectivo
$f_0$	– Valor inicial da função-objectivo $f$
$f_i, f_j$	– Componente do vector de carregamentos globais
$f_i^{(k)}$	– Função de aproximação do método MMA
$f_i(x)$	– Restrição $i$ no método MMA
$f_v$	– Fração volúmica de material
<b>f</b>	– Vector de carregamentos
$F$	– Função-objectivo normalizada
<b>F<sup>D</sup></b>	– Matriz dos vectores de solicitações mecânicas características
<b>F<sup>k</sup></b>	– Matriz dos vectores de solicitações termocaracterísticas
<b>F<sup>β</sup></b>	– Vector de solicitações termoelastocaracterísticas
<b>I</b>	– Matriz identidade
$k$	– Índice de iteração
<b>k</b>	– Matriz de condutividade térmica
<b>k<sup>h</sup></b>	– Matriz homogeneizada de condutividade térmica

---

$K_{ij}$	–	Componente da matriz de rigidez global
$K_m$	–	Subespaço de Krylov de dimensão $m$
$\mathbf{K}$	–	Matriz de rigidez global
$L_i$	–	Dimensões de uma célula representativa unitária paralelepipedica em na direcção $i$
$L_j$	–	Assimptota móvel inferior da variável $x_j$ no método MMA
$\mathbf{m}, \mathbf{i}, \mathbf{j}$	–	Vectores de armazenamento CRS
$\tilde{\mathbf{M}}$	–	Matriz global das derivadas parciais das funções de forma, para o campo de temperaturas
$M$	–	Número de carregamentos múltiplos
$n$	–	Número de linhas e colunas de uma matriz quadrada
$n_{\bar{n}}$	–	Número de coeficientes não-nulos de uma matriz
$n_e$	–	Número de elementos finitos
$\mathbf{n}_{\Gamma}$	–	Versor normal exterior a $\Gamma$
$N_{ey}$	–	Número de elementos microestruturais, <i>i.e.</i> da célula representativa unitária
$N_{ex}$	–	Número de elementos macroestruturais
$Oxyz$	–	Referencial de coordenadas globais
$O\xi\eta\zeta$	–	Referencial de coordenadas naturais
$p$	–	Penalidade da lei de potência SIMP
$\mathbf{p}$	–	Vector de direcção de busca do método do gradiente conjugado
$\mathbf{P}$	–	Carregamento equivalente / Matriz de condicionamento
$\mathbf{r}$	–	Resíduo associado à resolução de um sistema de equações
$r$	–	Índice de carregamento múltiplo
$\bar{R}_f$	–	Valor imposto para o raio de um filtro de sensibilidades ou de densidades
$s_0$	–	Parâmetro de controlo dos limites de actualização no método MMA
$t$	–	Índice de iteração
$\mathbf{t}_a$	–	Vector de tracção superficial
$T$	–	Campo de temperatura
$T'$	–	Vector de gradientes térmicos macroestruturais
$T_0$	–	Temperatura de referência
$u_i$	–	Componente de campo de deslocamentos
$\mathbf{u}$	–	Vector de deslocamentos
$\tilde{\mathbf{u}}$	–	Vector de deslocamentos solução do problema de equilíbrio global
$U_j$	–	Assimptota móvel superior da variável $x_j$ no método MMA
$v_e$	–	Volume do elemento $e$
$\bar{V}$	–	Volume prescrito como restrição global
$V_{ex}$	–	Volume do elemento macroestrutural $e_x$
$\bar{V}_Y$	–	Volume total da célula representativa unitária
$w_p$	–	Penalidade do método de penalidade para imposição de condições de fronteira
$w_r$	–	Peso de ponderação do carregamento $r$
$\mathbf{x}$	–	Vector solução de um sistema de equações
$\mathbf{x}^*$	–	Solução exacta de um sistema de equações
$\mathbf{y}$	–	Coordenadas microestruturais
$\mathbf{Y}$	–	Domínio da microescala
$\cdot^{(0)}$	–	Grandeza relativa à macroescala

---



$\cdot^{(1)}$	– Grandeza relativa à microescala
$\cdot^e$	– Relativo a um elemento macroestrutural
$\cdot^E$	– Relativo a um elemento macroestrutural
$[\cdot]^h$	– Valor homogeneizado
$\langle \cdot \rangle_{e_x}$	– Valor médio do elemento macroestrutural $e_x$
$\alpha, \beta$	– Escalar genérico / Parâmetro escalar do método do gradiente conjugado
$\alpha^h$	– Vector homogeneizado dos coeficientes de dilatação térmica
$\alpha_j$	– Limite de actualização inferior da variável $x_j$ no método MMA
$\beta_j$	– Limite de actualização superior da variável $x_j$ no método MMA
$\beta^h$	– Vector homogeneizado dos módulos térmicos
$\gamma^{e_y}$	– Função de controlo de esquema de ponto fixo num método de critério de óptimo, relativo ao elemento $e_y$ num problema local
$\Gamma$	– Fronteira de uma célula representativa unitária
$\varepsilon_{ij}$	– Componentes do tensor das deformações
$\zeta$	– Limite de actualização ( <i>move limit</i> )
$\theta$	– Escalar
$\iota$	– Parâmetro de controlo de ponderação de sensibilidades
$\kappa$	– Escalar genérico / Número de condição espectral
$\lambda$	– Vector de multiplicadores de Lagrange
$\lambda$	– Multiplicador de Lagrange
$\Lambda$	– Multiplicador de Lagrange associado à restrição de volume macroestrutural
$\mu_{\min}$	– Valor mínimo de densidade microestrutural
$\Pi$	– Função da sensibilidade local à variação da densidade $\mu$ no elemento $e_y$
$\Pi_m$	– Componente mecânica da função da sensibilidade local
$\Pi_t$	– Componente térmica da função da sensibilidade local
$\rho$	– Densidade macroestrutural
$\rho$	– Vector de densidades
$\sigma$	– Tensor de tensões
$\Upsilon$	– Matriz de deslocamentos termocaracterísticos
$\chi$	– Matriz de deslocamentos característicos
$\xi$	– Coeficiente de amortecimento num método de critério de óptimo
$\Psi$	– Vector de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva
$\Omega$	– Domínio da macroescala / Sólido tridimensional genérico
$\Omega'$	– Subdomínio de $\Omega$

## A.7 Discussão de Resultados

$d_m$	– Factor de relação entre as propriedades de dois materiais constituintes
$d_h$	– Divisão inteira do número de problemas pelo número de processadores em processamento distribuído
$D^h$	– Matriz homogeneizada de elasticidade
$D_{ij}^h$	– Componentes da matriz homogeneizada de elasticidade
$e_x$	– Elemento finito da macroescala

---

$e_p$	–	Eficiência do cálculo paralelo
$e'_p$	–	Eficiência do cálculo paralelo corrigida em processamento distribuído
$E_{ii}$	–	Módulo de elasticidade relativo à direcção $i$
$E_m$	–	Módulo de elasticidade da matriz / Módulo de elasticidade de um material isotrópico genérico
$E_r$	–	Módulo de elasticidade do reforço
$\bar{f}_v$	–	Fracção volúmica efectiva
$f_r$	–	Fracção volúmica de reforço
$f_v$	–	Fracção volúmica
$\mathbf{F}^D$	–	Matriz dos vectores de solicitações mecânicas características
$\mathbf{F}^\beta$	–	Vector de solicitações termoelastocaracterísticas
$\mathbf{F}^k$	–	Matriz dos vectores de solicitações termocaracterísticas
$g$	–	Restrição genérica
$G_{ij}$	–	Módulo de corte relativo às direcções $i$ e $j$
$h_{opt}$	–	Parâmetro de controlo de ponderação em optimização microestrutural
$k$	–	Coefficiente de condutividade térmica
$k_m$	–	Coefficiente de condutividade térmica da matriz / Coefficiente de condutividade térmica de um material isotrópico genérico
$k_r$	–	Coefficiente de condutividade térmica do reforço
$K$	–	Designação genérica de rigidez
$n_p$	–	Número de processadores
$n_h$	–	Número de problemas locais em processamento distribuído
$p$	–	Penalidade da lei de potência SIMP
$P$	–	Perímetro
$\bar{q}$	–	Fluxo superficial de calor por condução prescrito
$\bar{\mathbf{q}}$	–	Vector de fluxos superficiais de calor por condução prescritos
$\bar{R}_f$	–	Valor imposto para o raio de um filtro de sensibilidades ou de densidades
$s_0$	–	Parâmetro de controlo dos limites de actualização no método MMA
$S_p$	–	<i>Speed-up</i>
$S'_p$	–	<i>Speed-up</i> corrigido em processamento distribuído
$\mathbf{S}^h$	–	Matriz homogeneizada de flexibilidade
$t$	–	Tolerância de convergência no método do gradiente conjugado
$T$	–	Temperatura
$\bar{T}$	–	Temperatura prescrita
$\Delta T$	–	Variação de temperatura
$w_i$	–	Peso de ponderação em optimização de carregamentos múltiplos
$w_p$	–	Penalidade do método de penalidade para imposição de condições de fronteira
$w_t$	–	Peso do problema térmico em optimização multiobjectivo
$\alpha$	–	Coefficiente de expansibilidade térmica / Limite inferior de actualização do método MMA
$\alpha_m$	–	Coefficiente de expansibilidade térmica da matriz / Coefficiente de expansibilidade térmica de um material isotrópico genérico
$\beta$	–	Limite superior de actualização do método MMA
$\bar{\epsilon}$	–	Vector de deformações prescritas
$\zeta$	–	Limite móvel de um método de critério de óptimo ( <i>move limit</i> )
$\lambda$	–	Multiplicador de Lagrange associado à restrição local de volume

$\Lambda$	–	Multiplicador de Lagrange associado à restrição global de volume
$\nu_m$	–	Coefficiente de Poisson da matriz / Coeficiente de Poisson de um material isotrópico genérico
$\nu_r$	–	Coefficiente de Poisson do reforço
$\nu_{ij}$	–	Coefficiente de Poisson relativo às direcções $i$ e $j$
$\mu$	–	Densidade microestrutural
$\rho$	–	Densidade macroestrutural
$\rho_{\min}$	–	Densidade macroestrutural mínima
$\sigma_1, \sigma_2$	–	Tensões principais
$\bar{\sigma}$	–	Vector de tensões prescritas
$\Upsilon$	–	Matriz de deslocamentos termocaracterísticos
$\chi$	–	Matriz de deslocamentos característicos
$\Psi$	–	Vector dos coeficientes característicos de dilatação linear efectiva

## A.8 Siglas e Acrónimos

AGP	–	<i>Advanced Graphics Port</i>
API	–	<i>Application Programming Interface</i>
ATA	–	<i>Advanced Technology Attachment</i>
BIOS	–	<i>Basic Input/Output System.</i>
CAD	–	<i>Computer-Aided Design</i>
Cell BE	–	<i>Cell Broadband Engine architecture</i>
CG	–	<i>Conjugate Gradient</i>
CMP	–	<i>Chip MultiProcessor</i>
COMA	–	<i>Cache-Only Memory Architecture</i>
CONLIN	–	<i>CONvex LINearization</i>
COW	–	<i>Cluster Of Workstations</i>
CPU	–	<i>Central Processing Unit</i>
CRU	–	Célula Representativa Unitária
DHCP	–	<i>Dynamic Host Configuration Protocol</i>
DNS	–	<i>Domain Name System</i>
ECA	–	<i>Embedded Cell Approach</i>
EPD	–	Estado Plano de Deformação
EPT	–	Estado Plano de Tensão
ESO	–	<i>Evolutionary Structural Optimisation</i>
FGM	–	<i>Functionally Graded Material</i>
FSB	–	<i>Front Side Bus</i>
GCMMA	–	<i>Globally Convergent Method of Moving Asymptotes</i>
GL	–	Grau de Liberdade
GNU	–	<i>Gnu is Not Linux</i>
GPL	–	<i>General Public License</i>
GPU	–	<i>Graphics Processing Unit</i>
GSA	–	<i>Groung Structure Approach</i>
GSO	–	<i>Generalized Shape Optimisation</i>
GUI	–	<i>Graphical User Interface</i>

H1	– Metodologia de optimização hierárquica (densidades macroestruturais dependentes)
H2	– Metodologia de homogeneização inversa
H20	– Elemento finito isoparamétrico hexaédrico de 20 nós
H2Q	– CRU Hexagonal com elementos quadriláteros
H2T	– CRU Hexagonal com elementos triangulares
H3	– Metodologia de optimização hierárquica (densidades macroestruturais independentes)
H3H	– CRU prismática hexagonal com elementos hexaédricos
H3T	– CRU prismática hexagonal com elementos tetraédricos
H4	– Metodologia de optimização multiescala com uma única CRU (segundo H1)
H5	– Metodologia de optimização multiescala com uma única CRU (segundo H3)
H6	– Metodologia de optimização multiescala desacoplada
H7	– Metodologia de optimização multiescala em subdomínios com actualização de densidades macroestruturais
H8	– Metodologia de optimização multiescala em subdomínios com actualização de densidades macroestruturais
HEA	– Homogeneização por Expansão Assimptótica
HEX	– Distribuições hexagonais de reforço
HX8	– Elemento finito isoparamétrico hexaédrico de 8 nós
IANA	– <i>Internet Assigned Numbers Authority</i>
IC0	– Factorização Incompleta de Cholesky
IDE	– <i>Integrated Drive Electronics</i>
IP	– <i>Internet Protocol</i>
ISA	– <i>Instruction Set Architecture</i>
ISE	– <i>Isotropic Solid or Empty ground structures</i>
JAC	– Precondicionamento de Jacobi
KKT	– Karush-Kuhn-Tucker
LAN	– <i>Local Area Network</i>
LO	– <i>Layout Optimisation</i>
LSI	– <i>Large-Scale Integration</i>
M1	– Malha estruturada de $15 \times 5$ quadriláteros utilizada na resolução do problema MBB
M2	– Malha estruturada de $30 \times 10$ quadriláteros utilizada na resolução problema MBB
M3	– Malha estruturada de $60 \times 20$ quadriláteros utilizada na resolução do problema MBB
M4	– Malha estruturada de $120 \times 40$ quadriláteros utilizada na resolução do problema MBB
M5	– Malha estruturada de $240 \times 80$ quadriláteros utilizada na resolução do problema MBB
MAC	– <i>Media Access Control</i>
MBB	– Problema de optimização topológica (empresa Messerschmidt-Bälkow-Blohm)
MEF	– Método dos Elementos Finitos
MFA	– <i>Mean Field Approaches</i>

---

MFC	–	<i>Multi-Freedom Constraints</i>
MH1	–	Malha estruturada de $15 \times 5$ quadriláteros utilizada na resolução hierárquica do problema MBB
MH2	–	Malha estruturada de $30 \times 10$ quadriláteros utilizada na resolução hierárquica do problema MBB
MH3	–	Malha estruturada de $45 \times 15$ quadriláteros utilizada na resolução hierárquica do problema MBB
MIEM	–	Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica
MIMD	–	<i>Multiple Instruction streams/Multiple Data streams</i>
MISD	–	<i>Multiple Instruction streams/Single Data stream</i>
MMA	–	<i>Method of Moving Asymptotes</i>
MPI	–	<i>Message-Passing Interface</i>
MPICH	–	<i>Message-Passing Interface Chameleon</i>
MPP	–	<i>Massive Parallel Processors</i>
MPPA	–	<i>Massively Parallel Processor Array</i>
MSI	–	<i>Medium-Scale Integration</i>
NFS	–	<i>Network File System</i>
NIS	–	<i>Network Information System</i>
NORMA	–	<i>NOn-Remote Memory Access</i>
NTP	–	<i>Network Time Protocol</i>
NUMA	–	<i>Non-Uniform Memory Access</i>
NURBS	–	<i>Non-Uniform Rational Basis Spline</i>
OC	–	<i>Optimality Criteria</i>
OpenMP	–	<i>Open Multi-Processing</i>
OS	–	<i>Operating System</i>
P2Q	–	CRU rectangular com elementos quadriláteros
P2T	–	CRU rectangular com elementos triangulares
P3H	–	CRU Paralelipipédica com elementos hexaédricos
P3T	–	CRU Paralelipipédica com elementos tetraédricos
PARCONG	–	<i>PARallel CONjugate Gradient solver</i>
PATA	–	<i>Parallel ATA</i>
PC	–	<i>Personal Computer</i>
PCG	–	<i>Preconditioned Conjugate Gradient</i>
PCI	–	<i>Peripheral Component Interconnect</i>
PL	–	Programação Linear
PLS	–	Programação Linear Sequencial
PMA	–	<i>Periodic Microfield Approaches</i>
PQS	–	Programação Quadrática Sequencial
PVM	–	<i>Parallel Virtual Machine</i>
PXE	–	<i>Pre-eXecution Environment</i>
QD4	–	Elemento finito isoparamétrico quadrilátero de 4 nós
QD8	–	Elemento finito isoparamétrico quadrilátero de 8 nós
QD9	–	Elemento finito isoparamétrico quadrilátero de 4 nós
RAID	–	<i>Redundant Array of Inexpensive Disks</i> ou <i>Redundant Array of Independent Drives</i>
RAM	–	<i>Random Access Memory</i>
ROM	–	<i>Read-Only Memory</i>

SAN	–	<i>System Area Network</i> ou <i>Storage Area Network</i>
SATA	–	<i>Serial ATA</i>
SCSI	–	<i>Small Computer System Interface</i>
SERA	–	<i>Sequential Element Rejections and Admissions</i>
SFC	–	<i>Single-Freedom Constraints</i>
SIMD	–	<i>Single Instruction stream/Multiple Data streams</i>
SIMP	–	<i>Solid Isotropic Material with Penalisation</i>
SISD	–	<i>Single Instruction stream/Single Data stream</i>
SMP	–	<i>Symmetric MultiProcessing</i>
SO	–	<i>Structural Optimisation</i>
SP	–	Sem Precondicionamento
SPMD	–	<i>Single Program-Multiple Data</i>
SQR	–	Distribuições quadradas de reforço
SSI	–	<i>Small-Scale Integration</i>
SSOR	–	<i>Symmetric Successive Over-Relaxation</i>
T10	–	Elemento finito isoparamétrico tetraédrico de 10 nós
TCP	–	<i>Transmission Control Protocol</i>
TR3	–	Elemento finito isoparamétrico triangular de 3 nós
TT4	–	Elemento finito isoparamétrico tetraédrico de 4 nós
TTY	–	Derivado de TeleTYpewriter
UC	–	Unidade de Controlo
UMA	–	<i>Uniform Memory Access</i>
UP	–	Unidade de Processamento
UPS	–	<i>Uninterruptible Power Supply</i> ou <i>Uninterruptible Power Source</i>
USB	–	<i>Universal Serial Bus</i>
VBM	–	<i>Variational Bounding Methods</i>
VLSI	–	<i>Ultra-Large-Scale Integration</i>
VLSI	–	<i>Very-Large-Scale Integration</i>
YaST	–	<i>Yet another Setup Tool</i>

## Apêndice B

# Estratégias de Optimização Topológica Multiescala em Subdomínios

### B.1 Introdução

Tomando por base uma estrutura semelhante à apresentada nas Secções 6.4.1 e 6.4.2, apresentam-se nas secções seguintes alguns pontos relevantes no esclarecimento da formulação e da implementação da metodologias de optimização topológica multiescala por subdomínios (H7) desenvolvida neste trabalho. São ainda tecidas algumas considerações relativamente à metodologia de optimização topológica multiescala desacoplada (H6).

### B.2 Formulação do Problema em Elasticidade Linear

Considere-se que o domínio macroestrutural  $\Omega$  se divide num número finito de subdomínios  $\Omega_q$ ,  $q = 1, \dots, Q$ , tais que  $\Omega = \cup_{q=1}^Q \Omega_q$  e  $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \forall i \neq j$ . Cada um destes subdomínios tem propriedades de material constantes. O problema de optimização por subdomínios pode então escrever-se como [Bendsøe 1995]

$$\max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V}} \min_{\mathbf{u} \in U} \left[ \frac{1}{2} \sum_{q=1}^Q \bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u}) - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \right], \quad (\text{B.1})$$

onde  $\mathbf{u}$  é o campo de deslocamentos no equilíbrio, que minimiza a energia potencial.  $\rho$  é a variável de densidade macroscópica. Esta forma difere da utilizada para a formulação hierárquica pelo facto de se considerar as propriedades do material constantes em cada subdomínio  $q$ . Isto corresponde a um número de problemas locais equivalente ao número de subdomínios. A função de energia de deformação óptima  $\bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u})$  corresponde à solução do problema local (microescala) do subdomínio  $\Omega_q$  e é definida como

$$\bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \int_{\Omega_q} \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega \right]. \quad (\text{B.2})$$

Assim, o tensor constitutivo  $\mathbf{D}^h$  é constante em todo o subdomínio  $\Omega_q$ . Esta equação pode ainda escrever-se, por uma questão de conveniência, como

$$\bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u}) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ 0 \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} [D_{ijkl}^h(\mu) \bar{S}_{ijkl}(\mathbf{u})] , \quad \text{com} \quad (\text{B.3})$$

$$\bar{S}_{ijkl}(\mathbf{u}) = \int_{\Omega_q} \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega . \quad (\text{B.4})$$

A grandeza  $\bar{\mathbf{S}}$  [Bendsøe 1995] é o integral dos produtos diádicos  $\varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u})$  no subdomínio  $\Omega_q$ . À semelhança do problema de optimização hierárquica, o problema de subdomínios apresentado pode também escrever-se como (*vd.* Eq. 6.57)

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 \leq \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V \\ \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}}} \left[ \frac{1}{2} \sum_{q=1}^Q \bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u}) \right] , \quad (\text{B.5})$$

correspondente à minimização da energia de deformação elástica, sendo equivalente, no equilíbrio, à minimização do trabalho das forças externas. Esta formulação permite ainda a inclusão de diferentes estratégias de ponderação no operador  $\bar{S}_{ijkl}$ . Nestes casos, pode passar a designar-se o problema de minimização da energia de deformação como problema de minimização de uma média ponderada da energia de deformação. Aqui,  $\bar{S}_{ijkl}$  pode redefinir-se de diversas outras formas, utilizando diferentes ponderações para numericamente controlar a tendência e o comportamento geral do problema, como

$$\bar{S}'_{ijkl}(\mathbf{u}) = \int_{\Omega_q} \iota \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) d\Omega \quad (\text{B.6})$$

onde  $\iota$  é um parâmetro genérico de ponderação que pode ser definido para relacionar parcelas de influência  $\iota_x$  com os correspondentes valores totais  $\iota_{\Omega}$ , sendo  $\iota = \frac{\iota_x}{\iota_{\Omega}}$ . A utilização deste parâmetro permite controlar de forma mais flexível a forma como o comportamento efectivo da estrutura influencia o comportamento local.

Em termos numéricos, um aspecto interessante desta metodologia é ainda o facto de poder degenerar em dois casos-limite apresentados neste trabalho. Por um lado, se o número de domínios for  $Q = 1$ , a densidade macroestrutural é constante e existe apenas um problema local, passando a ser equivalente às metodologias H4/H5. Alternativamente, se o número de domínios for igual ao número de elementos finitos macroestruturais,  $Q = n_{ex}$ , passa a comportar-se como a optimização hierárquica, com um problema local por cada elemento finito macroestrutural. Refira-se ainda que a formulação aqui apresentada para a optimização multiescala em subdomínios poderá também ser adoptada no caso de optimização multiescala desacoplada abordada neste trabalho (*vd.* Sec. 6.5), definida como metodologia H6. Considera-se então um domínio apenas e o integral dos produtos diádicos  $\bar{\mathbf{S}}$  deve integrar também a densidade macroestrutural penalizada. Adicionalmente, o problema passa a ter apenas um acoplamento fraco, já que as restrições de volume de cada uma das escalas são desacopladas e as respectivas variáveis de densidade deixam de ter dependência directa, mantendo-se, no entanto, a influência constitutiva do problema microestrutural sobre o macroestrutural. Como referido anteriormente, salienta-se o facto de esta abordagem permitir a obtenção de uma topologia macroestrutural discreta, constituída por uma determinada fracção volumica de domínio ocupado por um dado material óptimo. Na realidade, em termos físicos, o problema macroestrutural corresponde a uma estratégia em tudo semelhante ao caso geral de optimização topológica com um material isotrópico ou com um material com uma microestrutura prescrita. No entanto, a topologia deste material é optimizada em simultâneo.



O procedimento para a determinação das condições de óptimo do problema de optimização por subdomínios é idêntico ao apresentado na Secção 6.4.2. Assim, o lagrangiano aumentado do problema global B.1 pode definir-se como

$$\mathcal{L} = \min_{\mathbf{u} \in U} \left[ \frac{1}{2} \sum_{q=1}^Q \bar{\Phi}(\rho, \mathbf{u}) - \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Gamma_{N_u}} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} d\Gamma \right) \right] - \frac{1}{2c} \left\{ \left[ \max \left\{ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right\} \right]^2 - \Lambda^2 \right\}, \quad (\text{B.7})$$

onde  $c$  é o parâmetro de penalidade e  $\Lambda \geq 0$  é o multiplicador de Lagrange associado à restrição global de desigualdade. Tomando  $\tilde{\mathbf{u}}$  como o campo de deslocamentos que é solução do problema de equilíbrio global, a condição de estacionariedade relativamente à variável de optimização  $\rho(\mathbf{x})$  define-se como

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\Phi}(\rho, \tilde{\mathbf{u}})}{\partial \rho} = \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (\text{B.8})$$

em pontos onde  $\rho$  tem valores intermédios ( $\rho \in ]0, 1[$ ). Nos extremos, a condição passa a ser definida com uma desigualdade ( $\leq$  quando  $\rho = 0$  e  $\geq$  quando  $\rho = 1$ ) [Rodrigues *et al.* 2002, Coelho 2009]. Note-se, no entanto, que estes extremos correspondem a pontos onde não é necessário resolver o problema local, correspondendo respectivamente ao material original ( $\mathbf{D} = \mathbf{D}^0$ ) ou à ausência de material ( $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ ). Por sua vez, a estacionariedade relativamente ao multiplicador de Lagrange conduz a

$$\Lambda = \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right]. \quad (\text{B.9})$$

A condição B.9 implica o cumprimento da restrição global de volume. Por sua vez, a condição B.8 traduz a estabilidade do multiplicador de Lagrange  $\Lambda$  no equilíbrio e na solução óptima, significando neste caso que a derivada da função densidade de energia relativamente às densidades globais é constante para qualquer  $\mathbf{x}$  (com  $0 < \rho < 1$ ) [Rodrigues *et al.* 2002, Coelho *et al.* 2008b].

A função lagrangiana do problema local (Eq. B.3), por sua vez, pode escrever-se como

$$\mathcal{L} = \left[ D_{ijkl}^h(\mu) \bar{S}_{ijkl}(\tilde{\mathbf{u}}) \right] - \lambda(\tilde{\mathbf{x}}) \left[ \int_{Y(\tilde{\mathbf{x}})} \mu dy - \rho(\tilde{\mathbf{x}}) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Este lagrangiano é definido em cada  $\mathbf{x} \in \Omega$  e o multiplicador  $\lambda$  é associado à restrição de volume local, que relaciona os campos de densidade local  $\mu$  com o valor global de densidade em cada ponto ( $\rho(\mathbf{x})$ ). Por sua vez,  $\bar{S}_{ijkl}(\tilde{\mathbf{u}})$  são as componentes de  $\bar{\mathbf{S}}$  associadas aos deslocamentos  $\tilde{\mathbf{u}}$  no equilíbrio em  $\tilde{\mathbf{x}}$ . À semelhança do realizado com o lagrangiano global, define-se a condição de estacionariedade relativamente à variável microestrutural  $\mu$  como

$$\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu} \bar{S}_{ijkl}(\tilde{\mathbf{u}}) = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \forall \mathbf{y} \in Y(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \text{com } 0 < \mu < 1, \quad (\text{B.11})$$

onde  $\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu}$  equivale à definição apresentada na equação 6.63 e corresponde às sensibilidades do tensor homogeneizado de elasticidade,  $D^h$ , relativamente à variação de  $\mu$ . Tal como no problema global, nos extremos estas condições tomam as desigualdades descritas anteriormente. A condição definida em B.11 deve ser satisfeita, para cada  $x$  em  $\Omega$ , em qualquer  $y$  da célula unitária.

O lagrangiano B.10 corresponde ao problema local definido pela função-objectivo  $\bar{\Phi}(\rho, \tilde{\mathbf{u}})$  (vd. Eq. B.2) no ponto óptimo. Estabelecendo a condição de estacionariedade relativamente à densidade global  $\rho$ , verifica-se que no óptimo  $\tilde{\mathbf{x}}$

$$\frac{\partial \bar{\Phi}(\rho, \tilde{\mathbf{u}})}{\partial \rho} = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (\text{B.12})$$

Substituindo na equação B.8 verifica-se que

$$\lambda(\mathbf{x}) = 2 \max \left[ 0, \Lambda + c \left( \int_{\Omega} \rho d\Omega - V \right) \right], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \text{com } 0 < \rho < 1. \quad (\text{B.13})$$

Note-se que, enquanto  $\lambda(\mathbf{x})$  é uma função, o segundo membro da equação anterior é constante em  $\Omega$  ( $0 < \rho < 1$ ) [Coelho 2009]. Assim, verifica-se que no ponto óptimo o multiplicador de Lagrange da restrição local será constante em todo o domínio macroestrutural. Associando os resultados anteriores, verifica-se ainda que condição de estacionariedade B.11 pode ser ainda escrita como

$$\frac{\partial D_{ijkl}^h(\mu)}{\partial \mu} \bar{S}_{ijkl}(\tilde{\mathbf{u}}) = \lambda(\tilde{\mathbf{x}}) = 2\Lambda, \quad \forall \mathbf{y} \in Y(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \text{com } 0 < \mu < 1, \quad (\text{B.14})$$

relacionando assim as condições de óptimo das diferentes escalas. Salienta-se ainda o facto de esta relação entre condições de óptimo de ambas as escalas não ser válida no caso de optimização topológica multiescala desacoplada, traduzindo o acoplamento fraco deste problema. Os problemas global e local têm neste caso restrições de volume independentes, tal como as variáveis de densidade  $\rho$  e  $\mu$ , deixando de ser válidas as condições definidas na equação B.12 e seguintes.

As condições estabelecidas são directamente extrapoláveis para a definição dos restantes tipos de problema abordados neste trabalho. Adicionalmente, o cálculo numérico de sensibilidades apresentado na expressão 7.69 pode também definir-se como

$$\Pi = \frac{\partial \langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle_{\Omega_q}}{\partial \mu(y)} \sum_{e=1}^N \frac{V_{e_x}}{V_{\Omega}} \left[ \langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \langle \varepsilon_{kl}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x} \right]. \quad (\text{B.15})$$

$\langle D_{ijkl}^h(\mu) \rangle$  corresponde à matriz constitutiva homogeneizada da topologia local óptima calculada, única para o subdomínio  $\Omega_q$  considerado,  $N = N_{e_x \in \Omega_q}$  ao número de elementos finitos pertencentes ao subdomínio e  $\langle \varepsilon_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}) \rangle_{e_x}$  à média das deformações globais no elemento finito macroestrutural  $e_x$ .

## Apêndice C

# *Cluster* Beowulf — Arquitectura de Nós, Rede e Periféricos

### C.1 Arquitectura de Nós

Um *cluster* consiste num conjunto de máquinas – nós do sistema – constituídas por processador, memória e eventualmente unidades de armazenamento de dados e periféricos, interligadas de modo a executar tarefas de uma forma cooperativa. Genericamente, cada nó pode ser uma máquina do tipo uniprocessador ou uma máquina SMP (*Symmetric MultiProcessing*), como, por exemplo, processadores multinúcleo actuais. Os *clusters* do tipo Beowulf, no entanto, são habitualmente computadores pessoais (PC – *Personal Computer*), com *hardware off-the-shelf*, ou seja, com componentes comuns, disponíveis no mercado da informática pessoal. Os principais componentes são descritos de forma resumida nas secções seguintes.

Cada nó é responsável pelo ambiente e pelo sistema operativo necessários para o processamento das tarefas associadas a um dado programa paralelo que lhe são alocadas. As condições necessárias são garantidas por um conjunto de componentes. Cada aplicação é efectivamente executada num processador. Este armazena dados sob a forma de registos binários na sua memória *cache* e memória RAM (*Random Access Memory*). As aplicações usam também componentes periféricos, como armazenamento permanente ou redes de comunicação, para tarefas “não-computacionais”. Todos os sistemas periféricos comunicam directamente com a memória RAM, onde o processador tem acesso aos dados necessários. Neste sentido, as diversas aplicações podem ser caracterizadas segundo as seguintes operações essenciais:

- Execução de instruções – operando com dados em registos e armazenando os resultados em novos registos, processados pelo CPU (*Central Processing Unit*);
- Carregamento de registos – carregar dados a partir da memória ou *cache* do processador para registos do processador para facilitar a execução da instrução, envolvendo o CPU, o *front-side bus* e a memória de sistema;
- Uso de periféricos – cópia de dados através de um barramento (*bus*) I/O, *i.e.* *input/output*, para ou da memória principal para permitir que tarefas “não-computacionais” ocorram, envolvendo o componente periférico, barramento I/O e a sua interface com a memória de sistema, e a própria memória de sistema.

As diferentes partes de um computador pessoal, intervenientes nestas operações, são descritas nos parágrafos seguintes.

O processador é a unidade principal de processamento de um computador, responsável pela execução das instruções. Note-se que cada nó pode ter mais que um processador, operando em

modo SMP. O nível mais baixo de codificação binária das instruções e acções executadas num processador são determinadas pela sua arquitectura ISA (*Instruction Set Architecture*). As ISA mais comuns em nós de *clusters* Beowulf actuais são as IA32 ou X86, e X86-64. Um determinado processador funciona a uma dada velocidade/frequência de relógio, relativa à frequência com que consegue executar instruções individuais. Apesar de ser um dos factores primordiais na avaliação de desempenho de processadores, note-se que a velocidade de relógio nem sempre pode ser directamente comparada. Processadores com diferentes velocidades de relógio podem ter desempenhos idênticos para determinadas tarefas. Da mesma forma, dois processadores com a mesma velocidade podem ter desempenhos muito diferentes. A avaliação da velocidade de um processador actual traz contudo diversas complexidades adicionais. Por um lado, os núcleos de processadores actuais são capazes de executar múltiplas instruções em simultâneo (*multithreading*). Por outro lado, os processadores actuais têm múltiplos núcleos (*multicore*), permitindo processamento paralelo de memória partilhada e originando algumas dificuldades de comparação com processadores de velocidade de relógio semelhante, mas funcionamento puramente em série. Assim, qualquer processador tem uma velocidade máxima teórica, determinada pela frequência de relógio, ISA e funcionamento dos diferentes componentes do processador. Esta velocidade é medida em flops<sup>1</sup> (*Floating-Point Operations per Second*). Tanto as instruções quanto os dados que passam pelo processador constituem informação trocada com a memória RAM. A memória RAM funciona a uma frequência muito inferior, normalmente medida em centenas de Hz, pelo que o funcionamento do processador é muitas vezes limitado pela velocidade de escrita e leitura na memória. Esta transição é atenuada pela memória *cache* do processador. Esta é uma pequena quantidade de memória rápida directamente ligada ao processador. Quando dados são copiados da RAM para utilização no processador são também armazenados na sua *cache*. Se for necessário utilizá-los novamente, o acesso é feito pelo processador directamente a esta memória. Isto leva a que diversas aplicações sejam condicionadas de modo a otimizar a troca de informação entre processador e memória em blocos que tirem partido da velocidade extra da *cache*. Com a evolução das velocidades dos processadores, a memória *cache* foi ainda dividida em níveis. Assim, é comum um processador ter *cache* de níveis L1, L2 e em alguns casos L3, numa sequência de dimensão crescente, menor desempenho e maior distância relativamente ao processador. Refira-se ainda que a *cache* de acesso mais imediato (L1) pode estar dividida em dois níveis, um de dados e outro de instruções. A quantidade (e configuração) de memória rápida associada a um processador é um factor determinante na sua velocidade efectiva. Por sua vez, a memória RAM do sistema é uma memória de armazenamento temporário, usada para armazenar dados e instruções. As instruções correspondem a operações efectivas executadas pelo processador, enquanto os dados podem ter diversas origens, desde o processador a controladores de diversos periféricos. Tanto as instruções quanto os dados constituem informações necessárias ao funcionamento do processador, pelo que é este que faz a utilização mais intensiva da memória através do barramento de memória. Os barramentos de memória operam tipicamente a frequências entre 100 MHz e 800 MHz, e são habitualmente designados de barramento frontal (FSB — *Front Side Bus*). Devido à diferença entre a velocidade do processador e a velocidade da memória, o FSB funciona como um dos maiores estrangulamentos ao desempenho. Tal como acontece nas comunicações via rede, os dois indicadores de desempenho do barramento de memória são a largura de banda e a latência de comunicação. A primeira diz respeito à quantidade de dados que pode ser trocada em simultâneo entre o processador e os circuitos da memória principal. A segunda diz respeito ao tempo efectivo de transporte de informação entre estes dois elementos. Note-se ainda que, idealmente, todo o bloco de dados a serem usados pelo processador numa dada aplicação deve estar armazenado na memória RAM. A alternativa, responsável por declínio acentuado de desempenho, é utilizar armazenamento em disco. Este armazenamento é prejudicial quer se for explícito (armazenamento efectivo de dados) quer se for implícito (como memória virtual, para colmatar limitações de espaço da memória RAM). Esta questão determina dimensão máxima do problema que pode ser resolvido em cada nó de forma eficiente.

---

<sup>1</sup>Uma calculadora básica de 4 operações tem um desempenho da ordem dos 10 flops, enquanto que um processador de última geração, como o Intel Core i7 965 XE, pode realizar mais de 70 Gflops com dupla precisão.

A memória é ligada aos periféricos por barramentos I/O. Estes periféricos podem ser desde controladores de vídeo a controladores de rede ou USB (*Universal Serial Bus*). Cada máquina tem diversos barramentos deste tipo, cada um ligado à memória por uma ponte (*bridge*). Sendo I/O uma das tarefas mais comuns num computador, este subsistema é parte integral de qualquer sistema computacional e é suportado pela placa-mãe (*motherboard*). A *motherboard* é um circuito integrado que contém a maioria dos componentes de um PC e a sua ligação, fornecendo a infra-estrutura física e lógica para a integração de cada subsistema. Este componente, como parte integrante do funcionamento de todos os outros, é determinante no funcionamento e desempenho de cada nó. Com a excepção do processador, a escolha da *motherboard* é a decisão mais importante para determinar as características de um nó. A integração dos diversos sistemas é feita através de diversos *sockets* e ligações, e funcionam como condicionantes para a escolha do processador, memória, etc. Refira-se que tanto o barramento de RAM quanto todos os barramentos I/O são parte integrante da *motherboard*. A combinação dos elementos lógicos que definem o seu funcionamento é designada de *chipset*, que aparece dividido em duas partições lógicas. A ponte norte (*northbridge*) é responsável pelo *front side bus*, que faz a ligação ao barramento da memória RAM, processador e AGP (*Advanced Graphics Port*) ou PCI (*Peripheral Component Interconnect*) *express*. Estas estão colocadas na *northbridge* para garantir o acesso privilegiado à memória RAM, razão pela qual surgem cada vez mais opções de integração dos processadores gráficos em operações de processamento. A ponte sul (*southbridge*) não está ligada directamente ao processador, e contém os barramentos I/O e qualquer periférico incluído, como controladores de disco ou portas USB. Um conjunto de portas particularmente importante na *southbridge* são as portas PCI, usadas para diversos tipos de placas de expansão e controladores, incluindo placas de rede. Refira-se ainda que, por questões de acesso rápido à memória, existem várias tecnologias de rede que usam portas PCI Express ligadas à *northbridge* (e.g. 10 Gbit Ethernet). As tecnologias de rede são elementos preponderantes no desempenho de um *cluster*, pelo que serão abordadas em maior detalhe na secção seguinte. Integrado na *motherboard* surge o BIOS (*Basic Input/Output System*). O BIOS é o bloco de *software* que inicia todos os sistemas de *hardware* até um estado em que o OS (*Operating System*) possa ser iniciado e assuma o controlo. É o primeiro *software* a ser executado, iniciando normalmente com uma avaliação do seu funcionamento, e verificação de memória e sistemas principais. Executa ainda código de iniciação presente nos periféricos, garantindo o seu correcto arranque. Refira-se ainda que o BIOS se encontra armazenado num circuito de memória ROM (*Read-Only Memory*). Depois da iniciação do sistema, o BIOS procura um dispositivo de arranque do sistema operativo, normalmente um dispositivo de armazenamento permanente (e.g. disco rígido ou disco óptico). Sendo uma opção pouco usada em computadores pessoais, num nó cliente de um *cluster* Beowulf é também comum a utilização de configurações PXE (*Pre-eXecution Environment*). Este é um sistema em que o sistema operativo de um nó arranca com base numa configuração fornecida por rede e numa imagem de arranque. Este sistema resulta da combinação de dois sistemas de rede comuns. Em primeiro lugar, o nó faz uma procura DHCP<sup>2</sup> (*Dynamic Host Configuration Protocol*). O servidor retorna um endereço IP (*Internet Protocol*), parâmetros adicionais de configuração e uma imagem de arranque do OS. A maioria das máquinas actuais suporta esta opção e muitos sistemas de gestão de *clusters* tiram proveito disto para a instalação e configuração de nós. Esta opção é essencialmente implementada por BIOS em *motherboards* com controladores integrados de Ethernet ou controladores externos com *firmware* compatível. Existe ainda a opção de licença GPL (*General Public License*) chamada *coreboot* (anteriormente designada de LinuxBIOS). Esta é uma implementação específica de BIOS, baseada num kernel Linux, que executa uma iniciação de *hardware* seguida da execução da componente lógica. Para além de tempos de arranque mais reduzidos, permite a configuração directa da BIOS e a execução directa de procedimentos, ou mesmo a integração do kernel de alguns sistemas operativos. À excepção da BIOS, todos os dados armazenados em memória são perdidos quando o computador é reiniciado ou desligado. Para armazenar memória de modo persistente é necessário recorrer a um meio de armazenamento fixo, não-volátil.

---

<sup>2</sup>O DHCP é um protocolo do serviço TCP/IP que fornece a configuração dinâmica e remota de endereços IP e outros parâmetros, e a configuração de rede para terminais cliente.

Tipicamente, mesmo dados da memória RAM são armazenados em disco quando as aplicações não os estão a utilizar, sendo transferida de novo quando necessário. A maioria dos *clusters* têm algum tipo de armazenamento persistente, normalmente um disco rígido, em cada nó, assim como algum tipo de armazenamento central (*e.g.* o disco do servidor). Discos rígidos são sistemas de armazenamento magnético, geridos por um controlador e ligados por algum tipo de barramento. Fisicamente, contêm vários discos em rotação e a leitura e a escrita de dados é optimizada de forma a corresponder à geometria do discos que resulte num melhor desempenho colectivo. Contêm ainda memória *cache* própria, de modo a evitar procedimentos redundantes. Os barramentos típicos são IDE/ATA (*Integrated Drive Electronics/Advanced Technology Attachment*), SCSI (*Small Computer System Interface*) e Serial ATA. Durante muito tempo, os discos IDE foram os mais comuns. Os discos SCSI são tipicamente utilizados em servidores pelo facto de funcionarem a velocidades mais elevadas. Este acréscimo de velocidade é maioritariamente responsabilidade de barramentos específicos, que suportam mais dispositivos e funcionam a velocidades superiores. Actualmente, os discos mais comuns são Serial ATA ou S-ATA, substituindo os controladores IDE na maioria das *motherboards* de PC actuais. A definição IDE, originalmente designada de ATA, foi renomeada de Parallel ATA (P-ATA) depois da introdução do padrão de armazenamento S-ATA. A maior diferença entre estes dois padrões, como a designação indica, é a utilização de barramentos séries em vez dos barramentos paralelos usados nos discos P-ATA e SCSI. As velocidades de transferência são mais elevadas, para além da utilização de cablagens mais pequenas permitir melhorias de acondicionamento. Em muitos casos, este padrão não traz necessariamente vantagens em termos de desempenho, já que continua limitado pela velocidade intrínseca dos discos, que não permitem tirar partido do barramento mais rápido. Refira-se que qualquer um dos padrões referidos utiliza discos com essencialmente a mesma tecnologia. A avaliação do seu desempenho depende largamente da velocidade de rotação dos discos. Quanto maior for a velocidade de rotação, menor será a latência e maior a largura de banda das comunicações associadas. Outro factor relevante no desempenho de um disco rígido é a dimensão da *cache* do controlador. É também comum em *clusters* a utilização da tecnologia RAID (*Redundant Array of Inexpensive Disks* ou *Redundant Array of Independent Drives*). Esta consiste numa forma de agregação das características e do desempenho de vários discos individuais. Este sistema é usado como se um disco único se tratasse, sendo várias as razões para a sua utilização. Por um lado, surge a possibilidade de ganho em desempenho no acesso ao disco, já que o desempenho de múltiplos discos será melhor que o desempenho de um disco isolado. Adicionalmente, o armazenamento é normalmente redundante, o que permite o funcionamento correcto do sistema mesmo em caso de falhas de disco e fornece segurança suplementar no caso de perda isolada de informação. Estas soluções podem ser implementadas por *software*, com *drivers* específicos, ou por *hardware*, recorrendo a um controlador RAID, um processador para a gestão de funções RAID e eventualmente um ligação SAN (*Storage Area Network*<sup>3</sup>). As configurações por *software* tendem a ser mais flexíveis e menos dispendiosas, mas podem consumir recursos computacionais significativos, visto a gestão de funções RAID ser suportada pelo processador. Este tipo de armazenamento é normalmente utilizado em nós armazenamento. Faz ainda sentido referir o armazenamento remoto. Este tipo de armazenamento, cuja utilização efectiva e suporte físico são idênticos ao armazenamento local, difere essencialmente na camada de transmissão de dados. No armazenamento remoto, a informação é transmitida via rede de comunicações (dedicada ou não) para o espaço de armazenamento central. Os protocolos mais comuns em *clusters* são sistemas NFS (*Network File System*). Diferem dos sistemas de armazenamento persistente anteriores no meio físico de comunicação e no formato de informação enviada, sendo neste caso utilizados formatos específicos do OS em vez de blocos de memória.

Um componente importante em qualquer computador pessoal é a placa gráfica. Este dispositivo

---

<sup>3</sup>Uma *Storage Area Network* é essencialmente uma *System Area Network* dedicada para a troca de dados com dispositivos de armazenamento não-volátil.



tem a função de fazer o *rendering*<sup>4</sup> do estado actual do GUI (*Graphical User Interface*) do sistema operativo e programas em utilização, e a sua transmissão para um monitor. Os utilizadores de um *cluster*, no entanto, interagem com as ferramentas computacionais de forma diferente. Sendo o acesso remoto o mais comum, as placas gráficas tornam-se elementos de reduzida importância. Mesmo numa utilização local, tipicamente apenas no servidor é utilizado um GUI e essencialmente para tarefas de gestão. O maior campo de aplicação efectiva das placas gráficas dos diversos nós de um *cluster* surge em visualização de grandes formatos, nomeadamente de *tiled displays*. Nestes casos, o *output* de várias placas gráficas é usado em paralelo para resultar em imagens de elevada resolução, em que cada nó fornece a sua parte de uma imagem que seria impossível de obter com um único dispositivo. Note-se, no entanto, que surgem actualmente diversas aplicações em que o elevado desempenho da geração actual de processadores gráficos (GPU – *Graphics Processing Units*) pode ser utilizado para executar tarefas de processamento dedicado.

Convém ainda salientar que um aspecto importante na construção de um *cluster* Beowulf ou qualquer sistema de computação paralela diz respeito à arrumação e ao acondicionamento. As configurações mais comuns oscilam entre caixas de PC em estantes e organização densa com caixas tipo gaveta (em *racks*). Os factores mais relevantes neste aspecto são a relação entre o espaço disponível e a dimensão do sistema, e o arrefecimento. Em *clusters* Beowulf de Classe I, baseados em computadores pessoais, é comum a utilização de caixas do tipo torre. Neste caso, devido às suas dimensões e ao espaço vazio no seu interior, o arrefecimento é normalmente mais simples. As configurações em *rack* surgem em produtos de Classe II. São nós de perfil muito baixo, empilhados em estruturas dedicadas. Esta opção fornece boa acessibilidade e facilidade de manutenção, mas, devido à maior densidade, obriga a maiores cuidados com o arrefecimento. Um pouco mais longe da filosofia Beowulf, surge o limite da configuração *rack*, com os servidores *blade*. Neste caso, os componentes de cada nó são agrupados em lâminas de forma a serem tão compactos quanto possível. Em muitos casos, componentes como a fonte de alimentação são comuns a vários nós. Apesar da elevada densidade atingida, os componentes são normalmente mais especializados. A sequência apresentada é também representativa em termos de custos.

## C.2 Rede e Periféricos

Ao falar de redes associadas a sistemas de computação paralela e distribuída, especialmente sistemas de multicomputadores que funcionam como uma única máquina, como os *clusters* Beowulf, é forçoso distinguir redes internas de redes externas, *i.e.* LAN (*Local Area Network*) interna e externa<sup>5</sup>.

A tecnologia de comunicação mais comum em redes locais (LAN) de *clusters* Beowulf é a Ethernet<sup>6</sup>. Esta rede baseia-se na transmissão de blocos de dados, especificando o protocolo da camada física e da camada controlo MAC (*Media Access Control*). Cada ponto da rede tem um endereço próprio, uma sequência de 48 bits normalmente apresentada em formato hexadecimal e conhecida como MAC-address. Segundo o protocolo global de comunicações TCP/IP (*Transmission Control Protocol/Internet Protocol*), a cada endereço MAC corresponde um endereço IP para identificação na rede. Sendo o padrão mais comum para redes locais de transmissão física, existe actualmente com os padrões 10Base-T Ethernet (IEEE 802.3 – 10 MBit/s), Fast Ethernet (IEEE 802.3u – 100 MBit/s), Gigabit Ethernet (IEEE 802.3z – 1 GBit/s) e 10 Gigabit Ethernet (IEEE 802.3ae – 10 GBit/s). Em termos de utilização na LAN interna de um *cluster*, é forçoso ter em atenção o desempenho da rede de comunicação e o seu impacto no desempenho global de comunicação,

<sup>4</sup>Não existindo uma tradução inequívoca do termo em português, *rendering* é globalmente aceite como o processo que permite processar a informação necessária para produzir um mapa de bits (imagem de tipo *raster*) para visualização.

<sup>5</sup>Com determinados tipos de rede (*e.g.* Myrnet) é comum designar a rede interna de SAN (*System Area Network*).

<sup>6</sup>Originalmente, a rede Ethernet foi criada para transmissão através de cabo coaxial partilhado. A sua designação vem de um paralelismo feito com as transmissões de rádio, em que todas as emissões partilham um meio único, que, por associação à designação clássica de éter (*ether*) para o ar, deu origem ao nome Ethernet.

pelo que a largura de banda deve ser elevada e a latência reduzida. Assim, para além de serem comuns redes Fast Ethernet em aplicações gerais, larguras de banda inferiores a 100 MBit/s não fazem sentido em aplicações de comunicações intensivas. Estando a sua aplicação perfeitamente difundida, é indicada a utilização de redes com largura de banda de 1 GBit/s ou superior. A utilização de Gigabit Ethernet BASE-T (designação atribuída ao protocolo Gigabit Ethernet com cablagem de cobre de categoria 5e ou 6, cabos de elevado desempenho) é o padrão actual em *clusters* Beowulf. Refira-se ainda que a utilização de rede 10-Gigabit Ethernet é ainda reduzida a aplicações específicas, já que, apesar da largura de banda elevada, permite apenas comunicações ponto-a-ponto.

Inicialmente, as redes Ethernet partilhavam literalmente um cabo coaxial onde todos os dispositivos de rede se ligavam. Esta configuração levava a que qualquer defeito parasse toda a rede. Além disso, qualquer informação enviada era recebida por todos os computadores, independentemente do destinatário. Apesar das placas serem normalmente configuradas para descartar a informação destinada a outros endereços, esta topologia de rede (topologia física em anel) criava grandes problemas em termos de segurança e desempenho, já que a largura de banda era totalmente partilhada. A solução para estas limitações, mantendo o protocolo-base, surge com os concentradores de rede (*hubs*) Ethernet, criando uma topologia física em estrela. Com esta configuração, os diferentes dispositivos enviam os dados e estes passam forçosamente pelo *hub*. Daqui, os dados são enviados a um *backbone*<sup>7</sup> ou outros segmentos de rede. Os *hubs*, no entanto, têm limitações. Uma das principais é o facto de permitirem colisões, pelo que as redes com esta configuração geram erros de comunicação crescentes com o nível de tráfego. A probabilidade de ocorrência de colisões é proporcional ao número de transmissões e ao volume de dados enviados, pelo que a rede se pode tornar congestionada em utilizações mais intensivas. A solução para esta limitação, particularmente importante na aplicação aqui em análise, reside na utilização de comutadores de rede (*switches*) Ethernet, transformando-se uma ligação *half-duplex* em *full-duplex*. Estes comutadores, apesar de a rede se manter idêntica, permitem uma maior largura de banda e cablagem simplificada. Apesar de estas redes manterem uma topologia física em estrela, a comutação realizada pelos *switches* aproximam a topologia de malha totalmente ligada. Um *switch* funciona inicialmente da mesma forma que um *hub*, mas vai gradualmente mapeando a rede e deixa de enviar pacotes de dados para portas às quais não se destinem. Este controlo de portas e endereços permite aproveitamento total da largura de banda intrínseca da rede na comunicação entre duas portas de um mesmo *switch*. Note-se, ainda, que apesar de não ser um factor preponderante numa LAN interna de um *cluster*, uma rede Ethernet comutada torna-se também mais segura que a versão de meio partilhado. Adicionalmente, um *cluster* permite, em condições normais, o acesso remoto. Neste sentido, é necessária a existência de um dispositivo de rede adicional no nó servidor para ligação à rede externa. Neste caso, as características deste dispositivo devem ser coerentes com a rede e o tipo de acesso disponíveis. Se a quantidade de acessos remotos e a troca de dados forem relevantes, pode ser necessária a existência de um nó dedicado para ligação externa ou a exclusão do nó servidor do processo de cálculo, de modo a não influenciar o desempenho do sistema.

Existem alguns elementos periféricos habituais em *clusters*, nomeadamente do tipo Beowulf. Os mais próximos de qualquer computador pessoal são os dispositivos de interface local: monitor, teclado e rato. Estes, no entanto, não são estritamente necessários, e são muitas vezes usados apenas para configuração ou monitorização local. Neste sentido, é comum a utilização de comutadores de partilha, de modo a que possam estar em simultâneo ligados a vários nós e permitam a comutação rápida entre eles. Um elemento essencial na maior parte destas aplicações é um sistema UPS (*Uninterruptible Power Supply* ou *Uninterruptible Power Source*), sistema também designado de fonte de alimentação ininterrupta ou *battery backup*. Este tipo de periférico é um sistema de alimentação eléctrica, usado quer para permitir alguma autonomia ao sistema em caso de interrupção de energia quer para manter uma diferença de potencial constante, anulando ruído

<sup>7</sup>Um *backbone* é um esquema central de ligações de rede destinado a comutar fluxos de dados entre diferentes pontos de acesso em redes de grandes dimensões, garantindo maior desempenho na transmissão de dados entre diferentes pontos de acesso.



e possíveis picos de tensão da rede, muitas vezes responsáveis por quebras de processos ou problemas de *hardware*. O tipo de UPS mais comum é classificado de *no-break*. Funciona da mesma forma que a bateria de um portátil, sendo carregada – ou mantida no nível de carga máxima – sempre que a fonte de alimentação tenha corrente e fornecendo a autonomia que o seu nível de carga permita sempre que o fornecimento externo de electricidade seja interrompido. A autonomia deste tipo de UPS depende das suas características, e das características e número de equipamentos a ela ligados. Estes são tipicamente os factores de selecção de uma UPS, conjugando o número de tomadas de alimentação que possui, a potência que garante, e a sua relação com a potência consumida pelos diversos dispositivos com a estabilidade e autonomia que se pretende. Sendo a autonomia obtida normalmente reduzida, é comum estes sistemas permitirem ainda algum tipo de comunicação com o sistema computacional (*e.g.* Ethernet, RS232) para enviar informações como o tipo de anomalia em termos de fornecimento de energia ou o nível actual da bateria. Neste tipo de configuração, o sistema tem um conjunto de acções predefinidas para garantir a segurança de dados e equipamento. Refira-se que existem ainda outros sistemas com a mesma função, sendo que o mais eficaz é a utilização de sistemas de geração alternativa de energia, como geradores, células de combustível, *etc.*

Note-se ainda que, especialmente em sistemas de maiores dimensões e/ou em sistemas de maior densidade, a refrigeração de todo o sistema deve ser correctamente avaliada. Em sistemas de Classe I, pouco densos e de reduzidas dimensões como o abordado neste trabalho, a refrigeração própria de cada um dos nós pode mostrar-se suficiente.

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Apêndice D

### Lista de Figuras

1.1	Esquema sinóptico da dissertação. . . . .	7
2.1	Representação esquemática (a) da fronteira de Pareto e linha de utopia ( $f^\circ$ ) e (b) normalização das funções-objectivo. . . . .	24
2.2	Exemplo de estrutura reticulada de Michell ( <i>Michell-cantilever</i> ). . . . .	25
2.3	Representação esquemática das abordagens comuns em otimização estrutural: (a) otimização paramétrica, (b) otimização de forma e (c) otimização topológica. . . . .	26
3.1	Representação esquemática das topologias mais comuns de rede estática: (a) em anel, (b) em anel cordal, (c) de malha totalmente ligada, (d) em estrela, (e) de malha bidimensional e (f) de hipercubo. . . . .	31
3.2	Representação esquemática dos barramentos (a) partilhado e (b) múltiplo. . . . .	32
3.3	Representação esquemática dos <i>cross switches</i> (a) unilateral e (b) bilateral. . . . .	33
3.4	Representação esquemática do modelo (a) COMA de um multiprocessador e (b) multicomputador (NORMA). . . . .	34
3.5	Representação esquemática da latência de comunicação de uma mensagem. . . . .	35
3.6	Ilustração esquemática da relação entre os tempos de execução sequencial e paralela, para a lei de Amdahl (caso particular de 5 processadores em paralelo). . . . .	36
3.7	Representação esquemática da rotina <code>MPI_BARRIER</code> . . . . .	43
3.8	Representação esquemática das principais rotinas de movimentação de dados para um grupo de quatro processos. . . . .	44
3.9	Representação esquemática de rotinas de computação global: (a) <code>MPI_REDUCE</code> , (b) <code>MPI_ALLREDUCE</code> e (c) <code>MPI_SCAN</code> . . . . .	45
3.10	Arquitecturas TOP500, lista de Junho de 2012: (a) parcela de sistemas e (b) parcela de desempenho global, de 1993 a 2012 [TOP500 2012]. . . . .	47
3.11	Família de sistemas operativos, lista TOP500 de Junho de 2012: (a) parcela de sistemas e (b) parcela de desempenho global, de 1993 a 2012 [TOP500 2012]. . . . .	48
4.1	Representação esquemática dos domínios associados ao problema térmico num corpo sólido tridimensional. . . . .	52
4.2	Representação esquemática dos domínios associados ao problema termoelástico num corpo sólido tridimensional. . . . .	54
5.1	Representação da função de penalização SIMP para diferentes penalidades. . . . .	65
5.2	Problemas típicos de instabilidade numérica em otimização topológica: (a) <i>checkerboards</i> , (b) dependência de malha e (c) soluções não-únicas [Sigmund e Petersson 1998]. . . . .	69

5.3	Representação derivada da função de penalização SIMP, considerando diferentes penalidades. . . . .	73
5.4	Pós-processamento de resultados de um problema bidimensional de otimização topológica: (a) resultados do problema de otimização topológica, (b) curvas de isovalores, (c) curvas suavizadas (CAD) e (d) malha de elementos finitos. . . . .	78
5.5	Exemplos (a) 2-D e (b) 3-D de pós-processamento de resultados de um problema de otimização topológica com base em técnicas de levantamento de forma e engenharia inversa a partir de núvens de pontos. . . . .	79
5.6	Representação esquemática de uma estrutura de procedimentos em otimização estrutural integrada. . . . .	80
6.1	Representação esquemática do material termoelástico heterogêneo $\Omega$ e da célula unitária $Y$ associada à microescala, utilizados no processo de homogeneização assintótica, de que resulta, com $\epsilon \rightarrow 0$ , o material homogêneo $\Omega^h$ . . . . .	84
6.2	Ilustração esquemática da aproximação de primeira ordem da expansão assintótica do campo de temperaturas, para um caso unidimensional — o campo de temperaturas, em $\Omega$ , é aproximado pela sobreposição do campo homogeneizado da macroescala, em $\Omega^h$ , com as flutuações de primeira ordem advindas da $Y$ -periodicidade do campo da microescala, em $Y$ . . . . .	88
6.3	Ilustração esquemática dos fluxos de informação associados às técnicas de homogeneização e de localização, que ocorrem entre a macroescala e a microescala. . .	89
6.4	Ilustração de metodologias multiescala de otimização topológica: (a) otimização de uma estrutura constituída por um material com uma dada microestrutura, (b) otimização simultânea de ambas as escalas, (c) otimização do material (homogeneização inversa ou estratégia local), (d) otimização da microestrutura para uma determinada aplicação estrutural, (e) otimização microestrutural simultânea para diferentes subdomínios macroestruturais e (f) otimização simultânea desacoplada de ambas as escalas. . . . .	90
7.1	Ilustração da estrutura modular do programa mainFRAN: (a) estrutura geral e (b) estrutura local. . . . .	104
7.2	Referenciais global e natural dos elementos isoparamétricos bidimensionais utilizados: (a) elemento triangular de 3 nós, (b) elemento quadrangular de 4 nós, (c) elemento quadrangular de 8 nós e (d) elemento quadrangular de 9 nós. . . . .	106
7.3	Referenciais global ( $Oxyz$ ) e natural ( $O\xi\eta\zeta$ ) dos elementos isoparamétricos tridimensionais utilizados: (a) elemento tetraédrico de 4 nós, (b) elemento hexaédrico de 8 nós, (c) elemento tetraédrico de 10 nós e (d) elemento hexaédrico de 20 nós. . . . .	107
7.4	Células representativas unitárias periódicas: (a) quadrilátera (2-D) e (b) hexaédrica (3-D). . . . .	108
7.5	Aplicação de condições de fronteira <i>Multi-Freedom Constraints</i> (MFC) com o método (a) de eliminação, (b) de penalidade e (c) dos multiplicadores de Lagrange. . . . .	112
7.6	Regiões de associação para a periodicidade de uma célula unitária cúbica ou paralelepípedica: (a,b) faces, (c) arestas e (d) vértices. . . . .	120
7.7	Regiões de associação para a periodicidade de uma célula unitária hexagonal: (a,b) faces, (c) arestas e (d) vértices. . . . .	120
7.8	Fluxograma de um algoritmo de otimização topológica em cálculo estrutural. . .	121
7.9	Fluxograma de resolução dos problemas de termoelasticidade. . . . .	123
7.10	Ciclo de iterações internas no OC. . . . .	126
7.11	Representação esquemática da selecção de modos de funcionamento multiescala do programa mainFRAN. . . . .	127
7.12	Representação esquemática geral dos modos de funcionamento do programa mainFRAN com otimização hierárquica e homogeneização inversa. . . . .	130

7.13	Representação esquemática dos modos de optimização hierárquica H1 e H3 do programa mainFRAN. . . . .	131
7.14	Representação esquemática dos modos de optimização hierárquica H4 a H8 do programa mainFRAN. . . . .	133
7.15	Representação esquemática das diferenças do algoritmo de abordagem local relativamente à estrutural macroestrutural de optimização topológica. . . . .	139
7.16	Ilustração dos sistemas de equações resultantes da decomposição de domínio (a) por nós e (b) por elementos. . . . .	142
7.17	Ilustração dos modos de cálculo paralelo/distribuído na resolução local de problemas de optimização hierárquica: (a) resolução em paralelo e resolução distribuída segundo os modos (b) H3 e (c) H1. . . . .	144
8.1	Representação esquemática de um <i>cluster</i> do tipo Beowulf. . . . .	149
8.2	<i>Cluster</i> Tarantux: (a) modelação CAD do sistema e (b,c) sistema real no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Aveiro. . . . .	150
9.1	Representação esquemática da célula representativa unitária de um material compósito reforçado com fibras contínuas segundo um arranjo quadrado. . . . .	165
9.2	Evolução da norma da matriz de elasticidade homogeneizada, $\ \mathbf{D}^h\ $ , com o refinamento das malhas de elementos finitos utilizadas. . . . .	166
9.3	Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise. Células representativas unitárias 2-D, discretizadas em (a) triângulos e (b) quadriláteros, e 3-D, discretizadas com (c) tetraedros e (d) hexaedros. . . . .	167
9.4	Gráficos de anisotropia plana, com a variação do coeficiente de elasticidade transversal com a orientação: (a) material isotrópico e (b) material tetragonal. . . . .	168
9.5	Deslocamentos característicos – modos normais (a) $\chi_{11}$ e (b) $\chi_{22}$ , e modo de corte (c) $\chi_{12}$ –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (d) $\Psi$ – e deslocamentos termocaracterísticos – (e) $\Upsilon$ – de uma CRU 2-D quadrada discretizada com elementos finitos quadrangulares. . . . .	170
9.6	Deslocamentos característicos – modos normais (a) $\chi_{11}$ , (b) $\chi_{22}$ e (c) $\chi_{33}$ , e modos de corte (d) $\chi_{12}$ , (e) $\chi_{23}$ e (f) $\chi_{13}$ –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (g) $\Psi$ – e deslocamentos termocaracterísticos – (h) $\Upsilon$ – de uma CRU 3-D cúbica discretizada com elementos finitos hexaédricos. . . . .	171
9.7	Representação vectorial dos campos de solicitações (a-c) mecânicas características, $\mathbf{F}^D$ , (d) termoelastocaracterística, $\mathbf{F}^\beta$ , e (e) termocaracterística, $\mathbf{F}^k$ , de uma CRU 2-D quadrada discretizada com elementos finitos quadrangulares. . . . .	171
9.8	Representação vectorial dos campos de solicitações (a-e) mecânicas características, $\mathbf{F}^D$ , (d) termoelastocaracterística, $\mathbf{F}^\beta$ , e (e) termocaracterística, $\mathbf{F}^k$ , de uma CRU 3-D cúbica discretizada com elementos finitos hexaédricos. . . . .	172
9.9	Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração dos modos de corte (a) $\chi_{12}$ para uma CRU 2-D e (b) $\chi_{13}$ para uma CRU 3-D. . . . .	172
9.10	Representação de CRU 3-D alternativas para o mesmo arranjo quadrado de fibras contínuas unidireccionais de reforço ( $f_r = 47\%$ ): (a) C1, (b) C2, (c) C3 e (d) C4. . . . .	173
9.11	Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração dos modos de corte $\chi_{13}$ , para as CRU alternativas (a) C1, (b) C2, (c) C3 e (d) C4. . . . .	174
9.12	Representação (a) de células representativas unitárias alternativas para a microestrutura de um material compósito com arranjo hexagonal de fibras contínuas unidireccionais de reforço e (b) da CRU prismática hexagonal regular utilizada. . . . .	174
9.13	Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise. Ilustração de células representativas unitárias: (a) hexagonal, (b) rectangular, (c) prismática hexagonal regular e (d) paralelepípedica, discretizadas com malhas regulares de (a,b) quadriláteros e (c,d) hexaedros. . . . .	175

9.14	Deslocamentos característicos – modos normais (a) $\chi_{11}$ e (b) $\chi_{22}$ , e modo de corte (c) $\chi_{12}$ –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (d) $\Psi$ – e deslocamentos termocaracterísticos – (e) $\Upsilon$ – de uma CRU 2-D hexagonal discretizada com elementos finitos quadrangulares. . . . .	177
9.15	Deslocamentos característicos – modos normais (a) $\chi_{11}$ , (b) $\chi_{22}$ e (c) $\chi_{33}$ e modos de corte (d) $\chi_{12}$ , (e) $\chi_{23}$ e (f) $\chi_{13}$ –, campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva – (g) $\Psi$ – e deslocamentos termocaracterísticos – (h) $\Upsilon$ – de uma CRU 3-D hexagonal discretizada com elementos finitos hexaédricos. . . . .	178
9.16	Y-periodicidade dos deslocamentos característicos, com ilustração dos modos de corte (a) $\chi_{12}$ para uma CRU hexagonal (2-D) e (b) $\chi_{13}$ para uma CRU prismática hexagonal regular (3-D). . . . .	178
9.17	Representação esquemática de um problema de termoelasticidade. Definição (a) bi- e (b) tridimensional. . . . .	179
9.18	Representação vectorial dos campos de fluxo superficial de calor por condução, com localização na microescala correspondente a um dos elementos macroestruturais. Exemplos de material homogéneo (a) bi- e (b) tridimensional. . . . .	180
9.19	Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 2-D de CRU quadradas: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução. . . . .	181
9.20	Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 2-D de CRU hexagonais: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução. . . . .	182
9.21	Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 3-D de CRU cúbicas: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução. . . . .	183
9.22	Representação de localização, para dois elementos macroestruturais, num problema 3-D de CRU prismáticas hexagonais regulares: (a) deformada e isovalores de tensão equivalente, (b) vectores e (c) isovalores do campo de fluxo superficial de calor por condução. . . . .	184
9.23	Representação esquemática do problema de optimização topológica MBB, considerando condições de fronteira de simetria. . . . .	185
9.24	Representação das malhas de elementos finitos seleccionadas para análise do problema de optimização topológica MBB, discretizadas com (a) $15 \times 5$ , (b) $30 \times 10$ , (c) $60 \times 20$ , (d) $120 \times 40$ e (e) $240 \times 80$ elementos finitos quadriláteros. . . . .	186
9.25	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método OC sem filtragem. . . . .	186
9.26	Problema de optimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resolvido com um método de critério de óptimo e sem técnicas de controlo de instabilidades: evolução (a) da função-objectivo e (b) da actualização de densidade máxima. . . . .	187
9.27	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método OC com um filtro de sensibilidade ( $F2$ , $\bar{R}_f = 1,25$ ). . . . .	188
9.28	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resolvido com um método de critério de óptimo e um filtro de sensibilidades $F2$ , com $\bar{R} = 1,25$ . . . . .	189
9.29	Exemplo de solução de Michell para o problema MBB [Rozvany 1998]. . . . .	189
9.30	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade ( $F2$ , $R = 1,25$ ). . . . .	190
9.31	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com a discretização M4 e um filtro de sensibilidades $F2$ . Comparação da resolução com os métodos OC e MMA de $s_0$ variável ( $0,0$ ), $s_0 = 0,1$ e $s_0 = 0,9$ . . . . .	190

9.32	Evolução (a) da variação máxima de densidade e (b) da restrição de volume para um problema de optimização topológica MBB, com a discretização M4 e um filtro de sensibilidades F2 ( $\bar{R}_f = 1,25$ ). Comparação da resolução com os métodos OC, e MMA de $s_0$ variável (0,0), $s_0 = 0,1$ e $s_0 = 0,9$ . . . . .	191
9.33	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método CONLIN e um filtro de sensibilidade (F2, $\bar{R}_f = 1,25$ ). . . . .	192
9.34	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade F3: (a-e) $\bar{R}_f = 2,5$ e (f-j) $\bar{R}_f = 5,0$ . . . . .	193
9.35	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de independência de malha. . . . .	193
9.36	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de densidade. . . . .	194
9.37	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com um método MMA e um filtro de sensibilidade, utilizando malhas de triângulos. . . . .	194
9.38	Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) utilizando controlo de perímetro: (a) $P \leq 5$ , (b) $P \leq 7,5$ , (c) $P \leq 10$ e (d) $P \leq 15$ . . . . .	195
9.39	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4 e restrições de perímetro ( $P \leq 5$ , $P \leq 7,5$ , $P \leq 10$ , $P \leq 15$ e $P \leq 20$ ). . . . .	195
9.40	Evolução (a) das restrições de perímetro e de volume, e (b) dos multiplicadores de Lagrange associados, para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4 e restrições de perímetro ( $P \leq 5$ e $P \leq 15$ ). . . . .	196
9.41	Topologias obtidas na resolução do problema MBB utilizando elementos quadriláteros quadráticos. . . . .	197
9.42	Comparação dos tempos de execução, em função do número de elementos finitos dos problemas, entre elementos lineares de 4 nós e quadráticos de 8 e 9 nós. . . . .	197
9.43	Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) utilizando as penalidades (a) $p = 1$ , (b) $p = 2$ , (c) $p = 3$ e (d) $p = 4$ . . . . .	198
9.44	Evolução da função-objectivo obtida na resolução do problema MBB (M4), utilizando as penalidades $p = 1$ , $p = 2$ , $p = 3$ e $p = 4$ . . . . .	199
9.45	Erro relativo associado à fracção volúmica efectiva das fases obtidas em optimização topológica em função da variação da densidade mínima, $\rho_{\min}$ , para fracções volúmicas impostas de $f_v = 0,2$ , $f_v = 0,5$ e $f_v = 0,8$ . . . . .	200
9.46	Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) utilizando (a) $d_m = 0,1$ , (b) $d_m = 0,01$ , (c) $d_m = 0,001$ e (d) $d_m = 0,0001$ . . . . .	200
9.47	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, resolvido com um método de continuação actuando sobre a penalidade do SIMP ( $p = 1, \dots, 4$ ). . . . .	201
9.48	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, resolvido com um método de continuação actuando sobre o raio de um filtro de sensibilidades. . . . .	202
9.49	Topologias obtidas na resolução do problema MBB utilizando elementos passivos ( $\rho = 1$ ). . . . .	202
9.50	Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) com restrição de volume (a) $f_v = 0,2$ , (b) $f_v = 0,4$ , (c) $f_v = 0,6$ e (d) $f_v = 0,8$ . . . . .	203
9.51	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretização M4, para diferentes fracções volúmicas de material. . . . .	203
9.52	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica MBB, com discretizações M1 a M5, resultante da prescrição de deslocamentos: (a) curvas obtidas e (b) curvas inversas. . . . .	205



9.53	Ilustração de desequilíbrios em zonas de densidade reduzida num problema de otimização topológica MBB, com discretização M4, resultante da prescrição de deslocamentos. . . . .	206
9.54	Topologias obtidas na resolução do problema MBB (M4) com tolerâncias de resolução de (a) $t = 10^{-1}$ e (b) $t = 10^{-2}$ . . . . .	206
9.55	Comparação de tempos de resolução de um problema de otimização topológica (M4) em função da variação dos parâmetros $d_m$ , densidade mínima, penalidade do SIMP e tolerância da resolução de sistema de equações. . . . .	207
9.56	Ilustração das condições de fronteira de um problema de termoelasticidade linear. . . . .	207
9.57	Topologias obtidas na resolução de um problema geral de termoelasticidade com elementos passivos: (a) $\Delta T = -1$ K, (b) $\Delta T = -0,1$ K, (c) $\Delta T = -0,05$ K, (d) $\Delta T = -0,025$ K, (e) $\Delta T = 0$ K, (f) $\Delta T = 0,025$ K, (g) $\Delta T = 0,05$ K, (h) $\Delta T = 0,1$ K e (i) $\Delta T = 1$ K. . . . .	209
9.58	Topologias obtidas na resolução de um problema de termoelasticidade: (a) $\Delta T = -1$ K, (b) $\Delta T = -0,1$ K, (c) $\Delta T = -0,05$ K, (d) $\Delta T = -0,025$ K, (e) $\Delta T = 0$ K, (f) $\Delta T = 0,025$ K, (g) $\Delta T = 0,05$ K, (h) $\Delta T = 0,1$ K e (i) $\Delta T = 1$ K. . . . .	209
9.59	Evolução da função-objectivo para um problema de otimização topológica em termoelasticidade, com diferentes valores de temperatura prescrita constante. . . . .	210
9.60	Evolução de um problema de otimização topológica em termoelasticidade, com temperatura prescrita constante de $\Delta T = 0,1$ K e $\Delta T = 1,0$ K: (a) evolução de sensibilidades locais e (b) evolução do carregamento termomecânico resultantes, para os elementos 1296 e 2124. . . . .	211
9.61	Representação esquemática das parcelas mecânica e termomecânica da função densidade de energia de deformação. . . . .	212
9.62	Topologias obtidas na resolução de um problema geral de termoelasticidade com temperaturas variáveis, utilizando uma fonte quente de (a) fluxo de calor superficial $\bar{q} = 40 \text{ Wm}^{-2}$ , e de temperatura imposta (b) $\Delta T = 0,1$ K e (c) $\Delta T = 1,0$ K. . . . .	212
9.63	Evolução de funções-objectivo obtidas na resolução de um problema de otimização topológica em termoelasticidade com imposição de um campo de temperaturas variável recorrendo a uma fonte quente com prescrição de temperaturas ou de fluxos superficiais de calor. . . . .	213
9.64	Evolução de um problema de otimização topológica em termoelasticidade com imposição de um campo de temperaturas variável recorrendo a uma fonte quente com prescrição de temperaturas ou de fluxos superficiais de calor: (a) sensibilidades locais e (b) carregamentos de origem térmica, para os elementos 1296 e 2124. . . . .	214
9.65	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com termoelasticidade, aplicando um campo de temperaturas constante de (a) $\Delta T = 0,1$ K e (b) $\Delta T = 1$ K. . . . .	215
9.66	Ilustração de carregamentos alternativos para a resolução de um problema de otimização topológica. . . . .	215
9.67	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com dois carregamentos múltiplos: (a) $w_2 = 0$ , (b) $w_2 = 0,2$ , (c) $w_2 = 0,5$ , (d) $w_2 = 0,8$ e (e) $w_2 = 1$ . . . . .	215
9.68	Topologias obtidas na resolução do problema MBB com três carregamentos múltiplos: (a) $w_3 = 1$ e (b) $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ . . . . .	215
9.69	Deformadas correspondentes aos três modos de carga do problema MBB multi-carregamento, para a topologia obtida na resolução do problema MBB com três carregamentos múltiplos, $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ , segundo os carregamentos (a) 1, (b) 2 e (c) 3. . . . .	215
9.70	Evolução das funções-objectivo na resolução de problemas de otimização topológica de carregamentos múltiplos ( $\mathbf{w} = \{1, 0, 0\}$ , $\mathbf{w} = \{0, 1, 0\}$ , $\mathbf{w} = \{0, 0, 1\}$ e $\mathbf{w} = \{1, 1, 1\}$ ). . . . .	216
9.71	Topologias correspondentes à soma de carregamentos (a) 1 e 2, e (b) 1, 2 e 3. . . . .	216
9.72	Representação esquemática de um problema multiobjectivo. . . . .	216



9.73	Topologias obtidas na resolução de um problema multiobjective com peso de ponderação do problema térmico (a) $w_t = 0$ , (b) $w_t = 0,1$ , (c) $w_t = 0,2$ , (d) $w_t = 0,4$ , (e) $w_t = 0,6$ , (f) $w_t = 0,8$ , (g) $w_t = 0,9$ e (h) $w_t = 1$ . . . . .	217
9.74	(a) Funções-objectivo mecânica, térmica e global, e (b) curva de Pareto da resolução de um problema multiobjective. . . . .	218
9.75	Representação dos campos de (a,b) temperaturas e (c,d) deslocamentos para as topologias correspondentes a um peso do objectivo térmico de (a,c) $w_t = 0,1$ e (b,d) $w_t = 0,9$ . . . . .	219
9.76	Representação esquemática do problema térmico a utilizar com o problema MBB numa abordagem multiobjective. . . . .	219
9.77	Topologias obtidas na resolução de um problema MBB multiobjective com peso de ponderação do problema térmico (a) $w_t = 0$ , (b) $w_t = 0,2$ , (c) $w_t = 0,4$ , (d) $w_t = 0,5$ , (e) $w_t = 0,6$ , (f) $w_t = 0,8$ e (g) $w_t = 1$ . . . . .	219
9.78	Representação das (a) funções-objectivo mecânica, térmica e global, e da (b) curva de Pareto da resolução do problema MBB multiobjective. . . . .	220
9.79	Topologias obtidas na resolução de um problema tridimensional de carregamentos alternativos, com peso de ponderação do segundo carregamento (b) $w_2 = 0$ , (c) $w_2 = 0,2$ , (d) $w_2 = 0,5$ , (e) $w_2 = 0,8$ e (f) $w_2 = 1$ . Definição (a) do primeiro e (g) do segundo carregamento. . . . .	221
9.80	Topologias obtidas na resolução de um problema bi- e tridimensional multiobjective, de viga encastrada, com peso de ponderação do problema térmico (b,g) $w_t = 0$ , (c,h) $w_t = 0,5$ e (d,i) $w_t = 1$ . Definição do problema (a,f) mecânico e (e,j) térmico. . . . .	222
9.81	Topologias obtidas na resolução de um problema tridimensional multiobjective, com peso de ponderação do problema térmico (b) $w_t = 0$ , (c) $w_t = 0,2$ , (d) $w_t = 0,5$ , (e) $w_t = 0,8$ e (f) $w_t = 1$ . Definição do problema (a) mecânico e (g) térmico. . . . .	222
9.82	Geometria deformada e distribuição óptima de material para a imposição de (a) deformação e (b) tensão uniaxial num problema 2-D. Representação do (c) carregamento equivalente antiperiódico no caso de tensão. . . . .	224
9.83	Deslocamentos característicos periódicos e carregamentos mecânicos característicos antiperiódicos de uma CRU 2-D: (a) $\chi_{11}$ e $\mathbf{F}_{11}^D$ , (b) $\chi_{22}$ e $\mathbf{F}_{22}^D$ , e (c) $\chi_{12}$ e $\mathbf{F}_{12}^D$ . . . . .	224
9.84	(a,b) Distribuição óptima de material para um problema de tracção uniaxial 3-D e (c) correspondente carregamento antiperiódico para o caso de imposição de um campo de tensão. . . . .	225
9.85	Ilustração de periodicidade para a repetição de CRU quadradas com imposição de condições de fronteira homogêneas e não-homogêneas: (a) deformada com distribuição óptima de material para $\bar{\varepsilon} = \{1,0; -1,0; 1,0\}$ e (b) deslocamentos característicos $\chi_{12}$ , (c) deformada com distribuição óptima de material para $\bar{\varepsilon} = \{0,0; 0,0; 1,0\}$ e (d) deslocamentos característicos $\chi_{22}$ . . . . .	225
9.86	Variação das funções-objectivo mecânica, térmica e total com $w_t$ num problema de optimização local multiobjective. . . . .	226
9.87	Curva de Pareto num problema de optimização local multiobjective. . . . .	227
9.88	Variação (a) do coeficiente de condutividade térmica, $k$ , e do módulo de Young, $E$ , e (b) do coeficiente de expansibilidade térmica, $\alpha$ , com o peso do objectivo térmico, $w_t$ . . . . .	228
9.89	Problema de optimização local 2-D: (a) distribuição óptima de material e (b) deslocamentos termocaracterísticos, $\Upsilon$ , (c) campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva, $\Psi$ , e (d-f) deslocamentos característicos, $\chi_{11}$ , $\chi_{22}$ e $\chi_{12}$ ( $w_t = 0,4$ ). . . . .	229

9.90	Exemplo de problema de otimização local 3-D: (a) distribuição óptima de material e (b) deslocamentos termocaracterísticos, $\Upsilon$ , (c) campo de coeficientes característicos de dilatação linear efectiva, $\Psi$ , e (d-i) deslocamentos característicos, $\chi_{11}$ , $\chi_{22}$ , $\chi_{33}$ , $\chi_{12}$ , $\chi_{23}$ e $\chi_{13}$ ( $w_t = 0,5$ ). . . . .	230
9.91	Resolução de problema de homogeneização inversa multiobjectivo, com um peso do problema térmico de $w_t = 0,0; 0,1; \dots; 1,0$ , sem controlo de estabilidade. . . .	231
9.92	Resolução de problema de homogeneização inversa multiobjectivo, com um peso do problema térmico de $w_t = 0,0; 0,1; \dots; 1,0$ , com filtros de sensibilidades. . . .	231
9.93	Ilustração de iterações intermédias na evolução de um problema de homogeneização inversa multiobjectivo com $w_t = 0,2$ : (a) $i = 6$ , (b) $i = 9$ e (c) $i = 22$ . . . . .	231
9.94	Variação do coeficiente de elasticidade em função da orientação e do peso do problema térmico, $w_t$ , num problema de homogeneização inversa multiobjectivo. . .	232
9.95	Evolução inicial da função-objectivo utilizando diferentes métodos na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ . . . . .	232
9.96	Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: sem filtragem e com filtragem de sensibilidades. . . . .	233
9.97	Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: sem filtragem e com filtragem de sensibilidades. . . . .	234
9.98	Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: sem filtragem e com filtragem de sensibilidades. . . . .	234
9.99	Topologias obtidas na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ , com diferentes níveis de refinamento de malha: sem filtragem e com filtragem de sensibilidades. . . . .	234
9.100	Divergência na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ : (a) evolução da função-objectivo e (b) variação do módulo de elasticidade $E_{11}$ normalizado. . . . .	235
9.101	Divergência na resolução de um problema de homogeneização inversa com imposição de uma deformação macroestrutural $\bar{\epsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ : topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para as iterações (a, b) 9, (c, d) 15, (e, f) 43, (g, h) 70, (i, j) 105, (k, l) 153, (m, n) 179 e (o, p) 200. . . . .	237
9.102	Soluções iniciais alternativas para problemas locais. . . . .	238
9.103	Soluções obtidas a partir de uma solução inicial homogénea com tolerância de resolução de sistema de (a) $10^{-4}$ e (b) $10^{-6}$ . . . . .	238
9.104	Ilustração da influência de uma solução inicial de nucleação aleatória: (a,b) $\bar{\epsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ e (c-e) $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ . . . . .	238
9.105	Ilustração da influência de soluções iniciais alternativas na homogeneização inversa: (a,d,g,j) soluções iniciais, (b,e,h,k) topologias obtidas para $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ e (c,f,i,l) topologias obtidas para $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ . . . . .	239
9.106	Ilustração da influência de soluções iniciais alternativas na homogeneização inversa: periodicidade das topologias obtidas para (a-d) $\bar{\epsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ e para (e-h) $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ . . . . .	239
9.107	Evolução e instabilidades de problemas não-filtrados de homogeneização inversa com soluções iniciais aleatórias alternativas. . . . .	240
9.108	Influência do parâmetro de relação entre materiais constituintes na topologia obtida para a imposição de $\bar{\epsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ : (a) $d_m = 0,1$ , (b) $d_m = 0,01$ , (c) $d_m = 0,001$ e (d) $d_m = 0,0001$ . . . . .	240

9.109	Exemplos de homogeneização inversa utilizando uma CRU hexagonal: (a) malha utilizada; topologias resultantes de (a, g) $\bar{\varepsilon} = \{0; 0; 1\}^T$ , (c, h) $\bar{\varepsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ , (d, i) $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ e (e, j) $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ , sem e com filtragem de sensibilidades, e (f) mapa de anisotropia para os casos de $\bar{\varepsilon} = \{1; 1; 0\}^T$ . . . . .	242
9.110	Problema de homogeneização inversa em termoelasticidade, sem filtragem de sensibilidades, com (a-c) $\bar{\varepsilon} = \{1; 0; 0\}^T$ e (d, f) $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ . $\Delta T$ é constante e igual a (a) 0,01 K, (b) 0,1 K e (c) 1 K. . . . .	243
9.111	Problema de homogeneização inversa em termoelasticidade, com filtragem de sensibilidades: $\bar{\varepsilon} = \{1; -1; 0\}^T$ com $\Delta T$ constante e igual a (a) 0,01 K, (b) 0,1 K e (c) 1 K. . . . .	243
9.112	Topologias obtidas para um problema térmico de homogeneização inversa, soluções com e sem filtragem de sensibilidades, de acordo com a orientação do fluxo de calor imposto. . . . .	244
9.113	Topologias intermédias na evolução iterativa de um problema térmico de homogeneização inversa, com filtragem de sensibilidades, para um caso de fluxo imposto (a, b) $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 4\}^T$ e (c, d) $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 5\}^T$ . . . . .	244
9.114	Exemplos 3-D de homogeneização inversa sem filtro de sensibilidades – fase rígida e fase flexível. . . . .	245
9.115	Exemplos 3-D de homogeneização inversa com filtro de sensibilidades. . . . .	246
9.116	Ilustração de periodicidade e mapas de anisotropia para os exemplos 3-D de homogeneização inversa com filtro de sensibilidades. . . . .	247
9.117	Homogeneização por expansão assintótica: topologia obtida como resposta a $\bar{\varepsilon} = \{0, 0, 0, 1, 1, 1\}^T$ , correctores mecânicos, termomecânico e térmico, e respectivas solicitações características. . . . .	248
9.118	Problema de homogeneização inversa térmico com $\partial \mathbf{T} / \partial \mathbf{x} = \{1; 0,5; 0,5\}^T$ e filtragem de sensibilidades: (a) topologia ótima e (b, c) soluções intermédias. . . . .	249
9.119	Optimização macroestrutural com diferentes topologias microestruturais e diferentes relações de magnitude de materiais constituintes: (a, f, k) microestruturas, (b, g, l) mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) e (c-e, h-j, m-o) topologias macroestruturais ótimas com diferenças crescentes entre materiais constituintes. . . . .	250
9.120	Optimização macroestrutural com microestruturas prescritas, de acordo com a orientação de uma inclusão elipsoidal, e diferentes relações de magnitude de materiais constituintes: (a, f, k, p) microestruturas, (b, g, l, q) mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) e (c-e, h-j, m-o, r-t) topologias macroestruturais ótimas com diferenças crescentes entre materiais constituintes. . . . .	251
9.121	Malhas utilizadas nos problemas globais de optimização topológica hierárquica: (a) MH1 – $15 \times 5$ elementos –, (b) MH2 – $30 \times 10$ elementos – e (c) MH3 – $45 \times 15$ elementos. . . . .	252
9.122	Topologias macroestruturais obtidas na optimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de MMA com (a-c) $s_0 = 0,1$ , (d-f) $s_0$ variável, (g-i) $s_0 = 0,9$ e (j-l) $s_0 = 0,95$ , assim como (m-o) CONLIN. . . . .	254
9.123	Evolução da função-objectivo para um problema de optimização topológica hierárquica (MH1 a MH3) utilizando o modo H1 e o método MMA. . . . .	255
9.124	Evolução da restrição global de volume para um problema de optimização topológica hierárquica, com discretizações MH1 a MH3, utilizando o modo H1 e diferentes configurações do método MMA e CONLIN. . . . .	255
9.125	Evolução das parcelas locais (elementos 1, 5, 13 e 56) da função-objectivo para um problema de optimização topológica hierárquica, problema MH1, utilizando o modo H1 e o método MMA. . . . .	256
9.126	Ilustração da distribuição do módulo de elasticidade $E_{11}$ para a topologia MH1 obtida na resolução de um problema de optimização topológica utilizando o modo H1 e o método MMA. . . . .	257

9.127	Ilustração da distribuição dos módulo de elasticidade (a) $E_{11}$ e (a) $E_{22}$ para a topologia MH1 obtida na resolução de um problema de otimização topológica utilizando o modo H1 e o método MMA, segundo uma escala logarítmica. . . . .	258
9.128	Resolução estritamente macroestrutural dos problemas de otimização topológica MH1, MH2 e MH3. . . . .	258
9.129	Evolução da função-objectivo macroestrutural na resolução hierárquica de um problema de otimização topológica. . . . .	259
9.130	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com (a-c) $\zeta = 0,1$ , (d-f) $\zeta = 0,2$ e (g-i) $\zeta = 0,5$ . . . . .	259
9.131	Evolução da função-objectivo na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com $\zeta = 0,1$ , $\zeta = 0,2$ e $\zeta = 0,5$ , para o problema MH1. . . . .	260
9.132	Evolução da restrição de volume na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com $\zeta = 0,1$ , $\zeta = 0,2$ e $\zeta = 0,5$ . . . .	260
9.133	Evolução do multiplicador de Lagrange, $\Lambda$ , na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e configurações de OC com $\zeta = 0,1$ , $\zeta = 0,2$ e $\zeta = 0,5$ . . . . .	261
9.134	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA com elementos macroestruturais quadráticos de 8 nós. . . . .	261
9.135	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica, utilizando o modo de cálculo H3 e diferentes métodos de otimização na resolução dos problemas locais: (a-c) CONLIN, (d-f) MMA e (g-i) OC. . . . .	263
9.136	Evolução inicial da função-objectivo dos problemas de otimização topológica hierárquica – H3 com CONLIN na resolução local e H1 com MMA e CONLIN. . .	263
9.137	Evolução da restrição global de volume do problema MH1 de otimização topológica hierárquica, utilizando o modo H3, com CONLIN, MMA e OC na resolução dos problemas locais. . . . .	264
9.138	Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume, $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e CONLIN nos problemas locais. . . . .	264
9.139	Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume, $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e MMA nos problemas locais. . . . .	265
9.140	Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume, $\lambda$ , para o problema de otimização hierárquica MH1, resolvido com H3 e OC nos problemas locais. . . . .	265
9.141	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H3 e CONLIN nas resoluções locais, com limites de densidades macroestruturais $0,2 \leq \rho \leq 0,8$ . . . . .	266
9.142	Erro relativo para diferentes modos de cálculo e métodos de otimização na resolução de problemas de otimização topológica hierárquica. . . . .	267
9.143	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1, com MMA de $s_0$ variável, e diferentes níveis de refinamento na malha microestrutural: (a-c) $10 \times 10$ , (d-f) $20 \times 20$ , (g-i) $30 \times 30$ e (j-l) $40 \times 40$ . . . . .	268
9.144	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA sem filtragem de sensibilidades locais. . . .	268
9.145	Evolução das densidades de dois elementos macroestruturais e da fracção volúmica local correspondente (l). . . . .	269

9.146	Topologias macroestruturais obtidas na otimização topológica hierárquica utilizando o modo de cálculo H1 e MMA com CRU hexagonais. . . . .	269
9.147	Ilustração de solução global e soluções locais para o problema de otimização topológica hierárquica, modo H1 e MMA, utilizando uma CRU com $20 \times 20$ elementos: (a) com e (b) sem filtragem de densidades locais. . . . .	270
9.148	Ilustração de solução global e soluções locais para o problema de otimização topológica hierárquica, modo H1 e MMA, utilizando CRU alternativas: (a) quadrada com $10 \times 10$ elementos, (b) quadrada com $40 \times 40$ elementos e (c) hexagonal com 450 elementos, . . . . .	271
10.1	Ilustração do problema mecânico: (a) geometria e condições de fronteira, (b) malha de elementos finitos e (c) representação da deformada. . . . .	274
10.2	Resíduos relativos na resolução de um sistema de equações com o método do gradiente conjugado, sem e com preconditionadores. . . . .	275
10.3	Variação do tempo total de resolução do problema em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	277
10.4	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	277
10.5	Evolução da eficiência, $e_p$ , com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	278
10.6	Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	278
10.7	Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, consecutivamente, de 1 a 12 processadores. . . . .	279
10.8	Distribuição ótima não-filtrada de material para um problema de otimização topológica: (a) topologia geral e (b) representações superior e inferior. . . . .	280
10.9	Variação dos tempos de resolução no problema de otimização topológica em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	280
10.10	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica. . . . .	281
10.11	Evolução da eficiência, $e_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica. . . . .	281
10.12	Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica. . . . .	282
10.13	Distribuição ótima de material para um problema de otimização topológica, utilizando um filtro de sensibilidades: (a) topologia geral e (b) representações superior e inferior alternativas. . . . .	283
10.14	Variação dos tempos de resolução no problema de otimização topológica em função do número de processadores, $n_p$ , utilizando um filtro de sensibilidades. . . . .	283
10.15	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica utilizando um filtro de sensibilidades. . . . .	284
10.16	Evolução da eficiência, $e_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica utilizando um filtro de sensibilidades. . . . .	285
10.17	Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro de sensibilidades. . . . .	285
10.18	Variação dos tempos de resolução num problema de otimização topológica em função do número de processadores, $n_p$ , utilizando um filtro de sensibilidades paralelizado. . . . .	286
10.19	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado. . . . .	286
10.20	Evolução da eficiência, $e_p$ , com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado. . . . .	287

10.21	Evolução da parcela do tempo correspondente a cada etapa de processamento com o número de processadores, $n_p$ , para o problema de otimização topológica, utilizando um filtro paralelizado. . . . .	287
10.22	Resíduos relativos na resolução de sistemas de equações para diferentes iterações do problema de otimização topológica com o método do gradiente conjugado preconditionado. . . . .	288
10.23	Malhas de elementos finitos utilizadas no problema de otimização multiescala 3-D: (a) problema global e (b) problemas locais. . . . .	289
10.24	Distribuição de material (a) no problema global e (b) nos problemas locais. . . .	290
10.25	Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, de 1 a 12 processadores, para o problema macroestrutural (global). . . .	290
10.26	Isovalores correspondentes ao número do processador a que cada subdomínio é alocado, de 1 a 12 processadores, para os problemas microestruturais (locais). . .	291
10.27	Variação do tempo total (Total) e de execução da segunda iteração (It.2) da resolução do problema de otimização hierárquica em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	291
10.28	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , das resoluções de sistema associadas a uma CRU, no problema de otimização hierárquica, com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	292
10.29	Evolução da eficiência, $e_p$ , das resoluções de sistema associadas a uma CRU, no problema de otimização hierárquica, com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	293
10.30	Resíduos relativos da resolução do sistema de equações do corrector $\chi_{11}$ associada a uma CRU 3-D, no problema de otimização hierárquica, para diferentes números de processadores, $n_p$ . . . . .	293
10.31	Resíduos relativos de uma resolução de sistema associada a uma CRU 2-D, num problema HEA, para diferentes números de processadores, $n_p$ , sem e com condições de fronteira MFC. . . . .	294
10.32	Análise do modo próprio de deformação $xy$ de um problema de HEA com uma CRU 2-D: (a) vectores de solicitação e deformada no final da primeira iteração do método do gradiente conjugado executado em (b) 1, (c) 2 e (d) 3 processadores. .	295
10.33	Ilustração do impacto de um processo de cálculo distribuído com balanceamento heterogéneo, com a execução de tarefas em série (S) e em paralelo (P), no desempenho de um sistema homogéneo de computação. . . . .	295
10.34	Isovalores correspondentes ao número do processador que a cada subdomínio é alocado, no caso de 10 processadores: (a) decomposição do problema global e (b) distribuição dos problemas locais. . . . .	296
10.35	Variação do tempo total de resolução do problema de otimização hierárquica, versão distribuída, em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	297
10.36	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , da versão distribuída de um problema de otimização topológica hierárquica com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	297
10.37	Evolução da eficiência, $e_p$ , da versão distribuída de um problema de otimização topológica hierárquica com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	298
10.38	Representação da evolução dos limites máximos de <i>speed-up</i> , $S_p$ , e eficiência, $e_p$ , no cálculo distribuído em sistemas de computação homogéneos com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	298
10.39	Representação da evolução das eficiências corrigidas, $e'_p$ , no cálculo distribuído em sistemas de computação homogénea com o número de processadores, $n_p$ . . . . .	299
10.40	Influência das comunicações na variação do tempo total de resolução do problema de otimização hierárquica, em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	300
10.41	Evolução do <i>speed-up</i> , $S_p$ , em função do número de processadores, $n_p$ , com a influência das comunicações. . . . .	300
10.42	Evolução da eficiência, $e_p$ , em função do número de processadores, $n_p$ , com a influência das comunicações. . . . .	301



10.43	Malhas de elementos finitos utilizadas num problema de otimização multiescala 2-D: (a) problema global e (b) problemas locais. . . . .	301
10.44	Variação do tempo de resolução na segunda iteração de um problema de otimização hierárquica 2-D de grão reduzido, em função do número de processadores, $n_p$ . . . . .	302
10.45	Evolução da eficiência, $e_p$ , da segunda iteração de um problema de otimização hierárquica 2-D de grão reduzido, em função do número de processadores, $n_p$ . . .	303
11.1	Evolução das funções-objectivo na resolução de problemas de otimização topológica hierárquica multicarregamento, com um peso do terceiro carregamento $w_3 = 0,0$ , $w_3 = 0,2$ , $w_3 = 0,5$ , $w_3 = 0,8$ e $w_3 = 1,0$ . . . . .	306
11.2	Topologias obtidas na aplicação multicarregamento de um problema de otimização topológica hierárquica, com um peso do terceiro carregamento (a) $w_3 = 0,0$ , (b) $w_3 = 0,2$ , (c) $w_3 = 0,5$ , (d) $w_3 = 0,8$ e (e) $w_3 = 1,0$ . . . . .	307
11.3	Definição das configurações de um problema de roda de bicicleta com ponderação multiobjectivo: (a) problema mecânico, (b) configuração 1 e (c) configuração 2 do problema térmico. . . . .	308
11.4	Valores óptimos das funções-objectivo na resolução de problemas de otimização topológica hierárquica multiobjectivo, com um peso do problema térmico de $w_t = 0,0$ , $w_t = 0,2$ , $w_t = 0,5$ , $w_t = 0,8$ e $w_t = 1,0$ , para as configurações (a) 1 e (b) 2. .	309
11.5	Evolução das funções-objectivo na resolução de problemas de otimização topológica hierárquica multiobjectivo, com um peso do problema térmico $w_t = 0,0$ , $w_t = 0,2$ , $w_t = 0,5$ , $w_t = 0,8$ e $w_t = 1,0$ , segundo a configuração (a) 1 e (b) 2. . .	310
11.6	Curvas de Pareto de problemas de otimização topológica hierárquica multiobjectivo, com um peso do problema térmico $w_t = 0,0$ , $w_t = 0,2$ , $w_t = 0,5$ , $w_t = 0,8$ e $w_t = 1,0$ , segundo a configuração (a) 1 e (b) 2. . . . .	311
11.7	Topologias obtidas na aplicação multiobjectivo de um problema de otimização topológica hierárquica com um peso do problema térmico $w_t = 0,0$ , comum a ambas as configurações. . . . .	311
11.8	Topologias obtidas na aplicação multiobjectivo de um problema de otimização topológica hierárquica, configuração 1, com um peso do problema térmico $w_t$ de (a) 0,2, (b) 0,5, (c) 0,8 e (d) 1,0. . . . .	312
11.9	Topologias obtidas na aplicação MO de um problema de otimização topológica hierárquica, configuração 2, com um peso do problema térmico $w_t$ de (a) 0,2, (b) 0,5, (c) 0,8 e (d) 1,0. . . . .	313
11.10	Solicitações de teste para otimização topológica multiescala: (a) flexão, (b) corte e (c) tracção. . . . .	315
11.11	Evolução das funções-objectivo, segundo estratégias H4 e H5, para os problemas de teste considerando uma malha M5. . . . .	316
11.12	Topologias locais obtidas para as solicitações de teste: (a) compressão, (b) tracção, (c) corte e (d) flexão. . . . .	316
11.13	Evolução das funções-objectivo para o problema de flexão com diferentes discretizações macroestruturais. . . . .	317
11.14	Evolução das funções-objectivo para o problema de flexão com diferentes tipos de ponderação e malha M5. . . . .	317

11.15	Topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para diferentes microestruturas em otimização multiescala H5 para diferentes solicitações e parâmetros: (a, b) compressão, (c, d) corte, (e, f) flexão, (g, h) flexão com ponderação de deformação equivalente, (i, j) flexão com ponderação de tensão equivalente, (k, l) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_1$ em iteração intermédia, (m, n) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_1$ , (o, p) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_2$ em iteração intermédia, (q, r) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_2$ , (s, t) solução inicial, e topologias homogêneas de (u) $\mu = 0,5$ e (v) $\mu = 0,5$ sem penalização. . . . .	319
11.16	Topologias e mapas de anisotropia (coeficiente de elasticidade) para diferentes microestruturas em otimização multiescala H5 segundo diferentes solicitações, com $d_m = 0,1$ : (a, b) corte com ponderação de deformação equivalente, (c, d) flexão com ponderação de deformação equivalente, (e, f) tracção com ponderação de deformação equivalente e (g, h) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_1$ . . . . .	320
11.17	Evolução das funções-objectivo segundo diferentes solicitações (corte e flexão), com ponderação usando deformações equivalentes ( $h_{opt} = 2.1$ ) e tensão principal $\sigma_1$ ( $h_{opt} = 2.3$ ). . . . .	321
11.18	Topologias locais óptimas obtidas com diferentes níveis de refinamento de malha, com (a-c) $20 \times 20$ e (d-f) $60 \times 60$ elementos finitos, em (a, d) corte, (b, e) flexão e (c, f) tracção. . . . .	321
11.19	Evolução das funções-objectivo de um problema de flexão com otimização multiescala desacoplada e ponderação com deformações equivalentes. Caso geral e problemas-limite micro- e macroestrutural. . . . .	322
11.20	Topologias óptimas de um problema de flexão com otimização multiescala desacoplada: problemas-limite (a, b) micro- e (c, d) macroestrutural. . . . .	323
11.21	Topologias óptimas de problemas de otimização multiescala desacoplada: (a, b) tracção, (c, d) corte, (e, f) flexão, (g, h) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_1$ , (i, j) flexão com ponderação de tensão principal $\sigma_2$ , (k, l) corte com ponderação de tensão principal $\sigma_1$ e (m, n) corte com ponderação de tensão principal $\sigma_2$ . . . . .	324
11.22	Ilustração de diferentes divisões de domínio, horizontais e verticais, utilizadas para teste dos modos de otimização multiescala H7/8: (a) 2h, (b) 3h, (c) 4h, (d) 5h, (e) 5b, (f) 2v e (g) 3v. . . . .	324
11.23	Evolução das funções-objectivo na otimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5. . . . .	325
11.24	Evolução das funções-objectivo na otimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios verticais e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5. . . . .	325
11.25	Exemplo de (a) divisão automática em 5 regiões através de isovalores de tensão principal $\sigma_1$ , com (b) distribuição de densidades macroestruturais e topologias microestruturais. . . . .	326
11.26	Evolução das funções-objectivo na otimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com diferentes divisões horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4. . . . .	327
11.27	Evolução dos multiplicadores de Lagrange das restrições locais de volume, $\lambda$ , na otimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4. . . . .	327
11.28	Evolução das funções-objectivo na otimização multiescala por regiões H7 de um problema de flexão com duas divisões horizontais e ponderação com deformações ( $h_{opt} = 2.1$ ) ou tensões ( $h_{opt} = 2.2$ ) equivalentes, para o exemplo de malha macroestrutural M4. . . . .	328



11.29	Ilustração do comportamento da estrutura num problema de optimização topológica multiescala por regiões, segundo o modo H7, com ponderação de (a-c) deformações e (d-e) tensões equivalentes: (a, d) campo inicial, (b, e) deformada e (c, f) campo final. . . . .	328
11.30	Topologias óptimas obtidas na optimização multiescala por domínios H7 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (2 a 4 regiões). . . .	330
11.31	Topologias óptimas obtidas na optimização multiescala por domínios H7 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (5 regiões). . . . .	331
11.32	Evolução das funções-objectivo na optimização multiescala por regiões H8 de um problema de flexão com dois subdomínios horizontais ou verticais, e ponderação com deformações equivalentes, para malhas macroestruturais M2 a M5. . . . .	331
11.33	Comparação entre os modos H7 e H8 da evolução das funções-objectivo na optimização multiescala por regiões de um problema de flexão com quatro subdomínios horizontais ou verticais, e ponderação com deformações equivalentes, para o exemplo da malha macroestrutural M4. . . . .	332
11.34	Exemplos de topologias obtidas na optimização multiescala por domínios H8 de um problema de flexão com diferentes divisões macroestruturais (2 e 3 regiões). .	332
11.35	Definição de um problema 3-D de (a) flexão e torção de uma viga encastrada, com representação da deformada de (b) flexão e (c) torção. Definição da separação de volumes, (d) 2 e (e) 3, para optimização multiescala por domínios. . . . .	333
11.36	Evolução da função-objectivo na resolução de um problema de viga encastrada, com flexão e torção, como carregamento simultâneo ou multicarregamento (ML), utilizando as metodologias H5, H7 e H8 (1, 2 e 3 regiões). . . . .	334
11.37	Topologias óptimas locais do problema de viga encastrada segundo uma metodologia H5: (a) referência de orientação, (b) carregamento simultâneo, (c) solução intermédia no problema de carregamento simultâneo, (d) carregamento múltiplo com pesos idênticos, e solução isolada dos problemas de (e) flexão e (f) torção. .	334
11.38	Topologias óptimas locais do problema de viga encastrada segundo metodologias multiescala de subdomínios: (a) H7 com duas regiões, (b) H7 com duas regiões e multicarregamento, (c) H7 com três regiões e (d) H8 com três regiões. . . . .	335
11.39	Representação de um suporte de aerofólio traseiro num automóvel de competição. .	336
11.40	Representação (a) de geometria e condições de fronteira de um problema de optimização de um suporte de aerofólio de um automóvel de competição, assim como de (b) uma divisão em duas regiões. . . . .	336
11.41	Evolução da função-objectivo na resolução de um problema de suporte de aerofólio de automóvel de competição, utilizando as metodologias H5, H6 e H8. . . . .	337
11.42	Topologias obtidas para um suporte de aerofólio de automóvel de competição: (a) referência de orientação, (b) H5, (c) periodicidade H5, (d) H5 com $d_m = 0,05$ , (e) H8 com duas regiões e topologias H6, (f) macro- e (g) microestrutural. . . . .	338

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

## Apêndice E

### Lista de Tabelas

1.1	Representação esquemática de possíveis abordagens alternativas a adoptar na leitura desta dissertação. . . . .	10
7.1	Lista de elementos finitos implementados no programa mainFRAN. . . . .	105
9.1	Estrutura geral do capítulo Validação e Resultados Preliminares (Cap. 9). . . . .	164
9.2	Propriedades termoelásticas da matriz (m) e reforço (r) do material compósito de alumínio reforçado com fibras de boro. . . . .	166
9.3	Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo quadrado –, analítica (A) e experimental (E) das propriedades elásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.). . . . .	169
9.4	Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo quadrado – e analítica (A) de propriedades termoelásticas e térmicas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.). . . . .	170
9.5	Erro absoluto das normas das matrizes constitutivas homogeneizadas em comparação com a CRU de referência (C3T). . . . .	173
9.6	Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo hexagonal –, analítica (A) e experimental (E) das propriedades elásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas de boro (47% vol.). . . . .	176
9.7	Resultados da avaliação numérica (N) – segundo um arranjo hexagonal – e analítica (A) de propriedades termoelásticas de um material compósito de matriz de alumínio reforçado com fibras cilíndricas unidireccionais contínuas de boro (47% vol.). . . . .	177
9.8	Propriedades termoelásticas e térmicas de um material isotrópico genérico. . . . .	185
9.9	Deslocamentos verticais normalizados, utilizando estratégias hierárquicas e uma resolução macroestrutural. . . . .	256
10.1	Tempos de processamento do algoritmo de resolução do sistema de equações lineares sem e com preconditionamento. . . . .	275
10.2	Tempos e respectivas fracções de processamento das principais partes da resolução do problema pelo método dos elementos finitos. . . . .	276

Esta página foi intencionalmente deixada em branco.

# Bibliografia

- [Alba *et al.* 2009] E. Alba, C. Blum e P. Asasi. *Optimization techniques for solving complex problems*. John Wiley & Sons Inc, Nova Jérsea, EUA, 2009.
- [Allaire 2002] G. Allaire. *Shape optimization by the homogenization method*. Applied Mathematical Sciences, Vol. 164, Springer-Verlag, Nova Iorque, EUA, 2002.
- [Allaire e Aubry 1999] G. Allaire e S. Aubry. On optimal microstructures for a plane shape optimization problem. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **17**(2-3):86–94, 1999.
- [Almasi e Gottlieb 1994] G.S. Almasi e A. Gottlieb. *Highly parallel computing*. 2.<sup>a</sup> Ed., The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Redwood City, Califórnia, EUA, 1994.
- [Amdahl 1967] G.M. Amdahl. *Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities*. Actas da 1967 AFIPS Spring Joint Computer Conference, AFIPS Press, Vol. 30, pp. 483–485, Reston, Virgínia, EUA, Abril, 1967.
- [Amir e Sigmund 2010] O. Amir e O. Sigmund. On reducing computational effort in topology optimization: how far can we go? *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **44**(1):25–29, 2010.
- [Amir *et al.* 2009] O. Amir, M.P. Bendsøe e O. Sigmund. Approximate reanalysis in topology optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **78**(12):1474–1491, 2009.
- [Amir *et al.* 2010] O. Amir, M. Stolpe e O. Sigmund. Efficient use of iterative solvers in nested topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **42**(1):55–72, 2010.
- [Amstutz 2010] S. Amstutz. Connections between topological sensitivity analysis and material interpolation schemes in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **43**(6):755–765, 2010.
- [Andrade-Campos *et al.* 2009] A. Andrade-Campos, J.A. Oliveira, A. Ramos, J.A. Pinho-da-Cruz e J.A. Simões. *Influência da Malha de Elementos Finitos no Processo de Remodelação Óssea*. Actas do 3.<sup>o</sup> Congresso Nacional de Biomecânica 2009, pp. 227–232, Bragança, Portugal, Fevereiro, 2009.
- [Andreassen *et al.* 2010] E. Andreassen, A. Clausen, M. Schevenels, B.S. Lazarov e O. Sigmund. Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **43**(1):1–16, 2010.
- [Arora 2004] J.S. Arora. *Introduction to optimum design*. 2.<sup>a</sup> Ed., Elsevier Academic Press, San diego, EUA, 2004.
- [Arora 2007a] J.S. Arora. *Introduction to optimization*. In Optimization of structural and mechanical systems, J.S. Arora (Ed.), pp. 1–34, World Scientific Publishing Co. Inc., Singapura, 2007.

- [Arora 2007b] J.S. Arora. *Optimization of structural and mechanical systems*. World Scientific Publishing Co. Inc., Singapura, 2007.
- [Axelsson 1996] O. Axelsson. *Iterative solution methods*. Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
- [Bakhvalov e Panasenko 1989] N.S. Bakhvalov e G.F. Panasenko. *Homogenization: averaging processes in periodic media*. Mathematics and its Applications (Soviet Series), Vol. 36, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Países Baixos, 1989.
- [Baldick 2006] R. Baldick. *Applied optimization: formulation and algorithms for engineering systems*. Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2006.
- [Banks-Sills *et al.* 1997] L. Banks-Sills, V. Leiderman e D. Fang. On the effect of particle shape and orientation on elastic properties of metal matrix composites. *Composites Part B — Engineering*, **28B**(4):465–481, 1997.
- [Barbosa 2000] J.M.G. Barbosa. *Paralelismo em processamento e análise de imagens médicas*. Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia Electrotécnica e de Computadores, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, Porto, Portugal, 2000.
- [Barrett *et al.* 1994] R. Barrett, M. Berry, T.F. Chan, J. Demmel, J.M. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine e H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, Filadélfia, EUA, 1994.
- [Basu 1987] A. Basu. Parallel processing systems: a nomenclature based on their characteristics. *IEE Proceedings — Computers and Digital Techniques*, **134**(3):143–147, 1987.
- [Bathe 1996] K.J. Bathe. *Finite element procedures*. Prentice-Hall International Editions Inc., Upper Saddle River, Nova Jérícia, EUA, 1996.
- [Böhm 2012] H.J. Böhm. *A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics*. ILSB Report / ILSB-Arbeitsbericht 206, Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics (ILSB), Vienna University of Technology, Viena, Áustria, 2012.
- [Belegundu e Chandrupatla 1999] A.D. Belegundu e T.R. Chandrupatla. *Optimization concepts and applications in engineering*. Prentice-Hall International Editions Inc., Upper Saddle River, Nova Jérícia, EUA, 1999.
- [Bendsøe 1989] M.P. Bendsøe. Optimal shape design as a material distribution problem. *Structural and multidisciplinary optimization*, **1**(4):193–202, 1989.
- [Bendsøe 1995] M.P. Bendsøe. *Optimization of structural topology, shape, and material*. Springer Verlag, Berlim, Alemanha, 1995.
- [Bendsøe 2001] M.P. Bendsøe. *Topology optimization*. In Encyclopedia of Optimization, C.A. Floudas e P.M. Pardalos (Eds.), Vol. 5, pp. 462–464, Springer, Nova Iorque, EUA, 2001.
- [Bendsøe e Kikuchi 1988] M.P. Bendsøe e N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**(2):197–224, 1988.
- [Bendsøe e Sigmund 1999] M.P. Bendsøe e O. Sigmund. Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of Applied Mechanics*, **69**(9):635–654, 1999.
- [Bendsøe e Sigmund 2003] M.P. Bendsøe e O. Sigmund. *Topology optimization: theory, methods, and applications*. Springer Verlag, Berlim, Alemanha, 2003.

- [Bendsøe *et al.* 1994] M.P. Bendsøe, J.M. Guedes, R.B. Haber, P. Pedersen e J.E. Taylor. An analytical model to predict optimal material properties in the context of optimal structural design. *Journal of Applied Mechanics*, **61**(4):930–937, 1994.
  - [Bensoussan *et al.* 1978] A. Bensoussan, J.L. Lions e G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*. North-Holland Publishing Co., Amesterdão, Países Baixos, 1978.
  - [Benzi 2002] M. Benzi. Preconditioning techniques for large linear systems: a survey. *Journal of Computational Physics*, **182**(2):418–477, 2002.
  - [Berke 1970] L. Berke. *Convergence behavior of optimality criteria based iterative procedures*. USAF AFFDL-TM-72-1-FEB, Janeiro, 1970.
  - [Borrvall 2001] T. Borrvall. Topology optimization using regularized intermediate density control. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(37-38):4911–4928, 2001.
  - [Borrvall e Petersson 2001] T. Borrvall e J. Petersson. Large-scale topology optimization in 3D using parallel computing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(46-47):6201–6229, 2001.
  - [Boucard *et al.* 2009] P.A. Boucard, S. Buytet e P.A. Guidault. A multiscale strategy for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **78**(1):101–126, 2009.
  - [Bourdin 2001] B. Bourdin. Filters in topology optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **50**(9):2143–2158, 2001.
  - [Brown 2003] R.G. Brown. *Engineering a Beowulf-style compute cluster*. Duke University Physics Department, Durham, EUA, 2003.
  - [Brown *et al.* 2000] K. Brown, S. Attaway e S. Plimpton. Parallel strategies for crash and impact simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **184**(2-4):375–390, 2000.
  - [Bruns e Tortorelli 2001] T.E. Bruns e D.A. Tortorelli. Topology optimization of non-linear elastic structures and compliant mechanisms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(26-27):3443–3459, 2001.
  - [Bruyneel e Duysinx 2004] A. Bruyneel e P. Duysinx. Note on topology optimization of continuum structures including self-weight. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **29**(4):245–256, 2004.
  - [Bruyneel *et al.* 2002] M. Bruyneel, P. Duysinx e C. Fleury. A family of MMA approximations for structural optimization. *Structural & Multidisciplinary Optimization*, **24**(4):263–276, 2002.
  - [Buyya *et al.* 2009] R. Buyya, C.S. Yeo, S. Venugopal, J. Broberg e I. Brandic. Cloud computing and emerging it platforms: Vision, hype, and reality for delivering computing as the 5th utility. *Future Generation Computer Systems*, **25**(6):599–616, 2009.
  - [Caglar 2004] S.G. Caglar. *An implementation of MPI 1.2 for linux clusters*. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Francisco, San Francisco, EUA, 2004.
  - [Campbell *et al.* 1978] L. Campbell, F. Engel Jr., T. Gibson, M. Greenfield, J. Harkins, B. Holberton, B. Martin, J. Matheny, J.C. Noll, R. Ragan, C. Sampson e B. Swain. Fortran 77. *Communications of the ACM*, **21**(10):806–820, 1978.
-

- [Challis *et al.* 2008] V.J. Challis, A.P. Roberts e A.H. Wilkins. Design of three dimensional isotropic microstructures for maximized stiffness and conductivity. *International Journal of Solids and Structures*, **45**(14-15):4130–4146, 2008.
- [Chamis 1984] C.C. Chamis. Simplified composite micromechanics equations for hygral, thermal and mechanical properties, *SAMPE (Society for the Advancement of Material and Process Engineering) Quarterly* **15**(3):14–23, 1984.
- [Chen *et al.* 2010] Y. Chen, S. Zhou e Q. Li. Multiobjective topology optimization for finite periodic structures. *Computers & Structures*, **88**(11-12):806–811, 2010.
- [Cheng e Olhoff 1981] K.T. Cheng e N. Olhoff. An investigation concerning optimal design of solid elastic plates. *International Journal of Solids and Structures*, **17**(3):305–323, 1981.
- [Cherkaev *et al.* 1998] A.V. Cherkaev, L.A. Krog e I. Küçük. Stable optimal design of two-dimensional elastic structures. *Control and Cybernetics*, **27**(2):265–282, 1998.
- [Chung 1999] P.W. Chung. *Computational methods for multi-scale/multi-physics problems in heterogeneous/composite structures*. Dissertação de Tese de Doutorado, Universidade do Minnesota, Minnesota, EUA, 1999.
- [Chung *et al.* 2001] P. Chung, K. Tamma e R. Namburu. Asymptotic expansion homogenization for heterogeneous media: computational issues and applications. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, **32**(9):1291–1301, 2001.
- [Chung *et al.* 2006] S.W. Chung, C.S. Lee e S.J. Kim. Large-scale simulation of crack propagation based on continuum damage mechanics and two-step mesh partitioning. *Mechanics of Materials*, **38**(1-2):76–87, 2006.
- [Cioranescu e Donato 1999] D. Cioranescu e P. Donato. *An introduction to homogenization*. Oxford Lecture Series in Mathematics and Its Applications, Vol. 17, Oxford University Press, Oxford, Reino Unido, 1999.
- [Coelho 2009] P.G. Coelho. *Modelos hierárquicos para a análise e síntese de estruturas e materiais com aplicações à remodelação óssea*. Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Especialidade de Resistência dos Materiais, Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Lisboa, Portugal, 2009.
- [Coelho *et al.* 2008a] P.G. Coelho, P.R. Fernandes, J.B. Cardoso, J.M. Guedes e H.C. Rodrigues. *Hierarchical topology optimisation of structures subjected to constraints on material design*. Actas da EngOpt2008 — International Conference on Engineering Optimisation, Rio de Janeiro, Brazil, Junho, 2008.
- [Coelho *et al.* 2008b] P.G. Coelho, P.R. Fernandes, J.M. Guedes e H.C. Rodrigues. A hierarchical model for concurrent material and topology optimisation of three-dimensional structures. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **35**(2):107–115, 2008.
- [Coelho *et al.* 2009] P.G. Coelho, P.R. Fernandes e H.C. Rodrigues. Numerical modeling of bone tissue adaptation – A hierarchical approach for bone apparent density and trabecular structure. *Journal of Biomechanics*, **42**(7):830–837, 2009.
- [Coelho *et al.* 2011a] P.G. Coelho, J.B. Cardoso, P.R. Fernandes e H.C. Rodrigues. Parallel computing techniques applied to the simultaneous design of structure and material. *Advances in Engineering Software*, **42**(5):219–227, 2011.
- [Coelho *et al.* 2011b] P.G. Coelho, P.R. Fernandes e H.C. Rodrigues. Multiscale modeling of bone tissue with surface and permeability control. *Journal of Biomechanics*, **44**(2):321–329, 2011.



- [Cook *et al.* 1989] R.D. Cook, D.S. Malkus e M.E. Plesha. *Concepts and applications of finite element analysis*. 3.<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, Nova Iorque, EUA, 1989.
- [Costa 2010] J. Costa. *Método dos elementos finitos: análise de desempenho computacional paralelo*. Dissertação de Mestrado, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 2010.
- [Costa *et al.* 1999] L. Costa, P. Oliveira, I. Figueiredo e R. Leal. *Compliance minimization of a composite laminated plate by genetic algorithms*. Proceedings of the ECCM99 — European Conference on Computational Mechanics, pp. 740–741, Munique, Alemanha, Agosto, 1999.
- [Culler *et al.* 1998] D.E. Culler, J.P. Singh e A. Gupta. *Parallel computer architecture: a hardware/software approach*. Morgan Kaufmann Publishers, Inc., São Francisco, Califórnia, EUA, 1998.
- [Cunha *et al.* 2005] J.C. Cunha, O.F. Rana e P.D. Medeiros. Future trends in distributed applications and problem-solving environments. *Future Generation Computer Systems*, **21**(6):843–855, 2005.
- [Dal Maso 1993] G. Dal Maso. *An introduction to  $\Gamma$ -convergence*. Birkhäuser, Boston, EUA, 1993.
- [D’Ambra *et al.* 2002] P. D’Ambra, M. Danelutto, D. di Serafino e M. Lapegna. Advanced environments for parallel and distributed applications: a view of current status. *Parallel Computing*, **28**(12):1637–1662, 2002.
- [Das 1997] P.S. Das. *Evolution and application of a parallel algorithm for explicit transient finite element analysis on SIMD/MIMD computers*. Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Departamento de Engenharia Mecânica, Florida Atlantic University, Florida, EUA, 1997.
- [Dasgupta *et al.* 1990] P. Dasgupta, R.C. Chen, S. Menon, M. Pearson, R. Ananthanarayanan, U. Ramachandran, M. Ahamad, R.Jr. LeBlanc, W. Applebe, J.M. Bernabeu-Auban, P.W. Hutto, M.Y.A. Khalidi e C.J. Wilekloh. The design and implementation of the clouds distributed operating system. *Computing Systems Journal*, **3**(1):11–46, 1990.
- [Dasgupta *et al.* 1996] A. Dasgupta, R.K. Agarwal e S.M. Bhandarkar. Three-dimensional modelling of woven-fabric composites for effective thermo-mechanical and thermal properties. *Composites Science and Technology*, **56**:209–223, 1996.
- [Davies 1994] N.J. Davies. *The performance and scalability of parallel systems*. Dissertação de Tese de Doutorado em Informática, Departamento de Informática, Universidade de Bristol, Reino Unido, 1994.
- [Davies *et al.* 2006] J. Davies, R. Whittaker e W. von Hagen. *SUSE linux 10 bible*. Wiley Publishing Inc., Indianápolis, EUA, 2006.
- [De Giorgi e Spagnolo 1973] E. De Giorgi e E.D.G.S. Spagnolo. Sulla convergenza degli integrali dell’energia per operatori ellittici del secondo ordine. *Bollettino della Unione Matematica Italiana*, **8**(4):391–411, 1973.
- [de Kruijf *et al.* 2007] N. de Kruijf, S. Zhou, Q. Li e Y.W. Mai. Topological design of structures and composite materials with multiobjectives. *International Journal of Solids and Structures*, **44**(22-23):7092–7109, 2007.
- [Desmorat 2007] B. Desmorat. Structural rigidity optimization with frictionless unilateral contact. *International Journal of Solids and Structures*, **44**(3-4):1132–1144, 2007.
- [Diaz e Lipton 1997] A. Diaz e R. Lipton. Optimal material layout for 3D elastic structures. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **13**(1):60–64, 1997.

- [Diaz e Sigmund 1995] A. Diaz e O. Sigmund. Checkerboard patterns in layout optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **10**(1):40–45, 1995.
- [Dieter 2000] G.E. Dieter. *Engineering design: a materials and processing approach*. 3.<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering, McGraw-Hill, Singapura, 2000.
- [Dijk *et al.* 2010] N.P. Dijk, G.H. Yoon, F. Keulen e M. Langelaar. A level-set based topology optimization using the element connectivity parameterization method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **42**(2):269–282, 2010.
- [Dorn *et al.* 1964] W.S. Dorn, R.E. Gomory e H.J. Greenberg. Automatic design of optimal structures. *Journal de mecanique*, **3**:25–52, 1964.
- [Dorta *et al.* 2005] A.J. Dorta, J.M. Badia, E.S. Quintana e F. de Sande. *Implementing OpenMP for clusters on top of MPI*. Actas da PVM/MPI’05 — 12th European PVM/MPI users’ group conference on Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, B. Martino, D. Kranzlmüller e J. Dongarra (Eds.), pp. 148–155, Sorento, Itália, Setembro, 2005.
- [Dowling 1999] N.E. Dowling. *Mechanical behaviour of materials*. 2.<sup>a</sup> Ed., Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérсия, EUA, 1999.
- [DTM 2012] *DTM technisches reglement 2012*, 2012.
- [Duff *et al.* 1989] I.S. Duff, A.M. Erisman e J.K. Reid. *Direct methods for sparse matrices*. Oxford University Press, Londres, Reino Unido, 1989.
- [Duncan 1990] R. Duncan. A survey of parallel computer architectures. *IEEE Computer*, **23**(2):5–16, 1990.
- [Duysinx 1997] P. Duysinx. *Layout optimization : a mathematical programming approach*. Relatório técnico, 1997.
- [El-Sayed e Hsiung 1991] M.E.M. El-Sayed e C.K. Hsiung. Optimum structural design with parallel finite element analysis. *Computers & structures*, **40**(6):1469–1474, 1991.
- [Elad 2002] M. Elad. On the origin of the bilateral filter and ways to improve it. *IEEE Transactions on Image Processing*, **11**(10):1141–1151, 2002.
- [Evgrafov *et al.* 2008] A. Evgrafov, C.J. Rupp, K. Maute e M.L. Dunn. Large-scale parallel topology optimization using a dual-primal substructuring solver. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **36**(4):329–345, 2008.
- [Fahmy e Ragai 1970] A.A. Fahmy e A.N. Ragai. Thermal-expansion behavior of two-phase solids. *Journal of Applied Physics*, **41**(13):5108, 1970.
- [Farhat e Wilson 1987] C. Farhat e E. Wilson. A new finite element concurrent computer program architecture. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**:1771–1792, 1987.
- [Felippa 2004] C. Felippa. *Introduction to finite element methods — material assembled from lecture notes for the course Introduction to Finite Elements Methods*. Aerospace Engineering Sciences Department of the University of Colorado, Boulder, EUA, 2004.
- [Feng 1972] T.Y. Feng. *Some characteristics of associative/parallel processing*. Actas da 1972 Sagamore Computing Conference, pp. 5–16, Agosto, 1972.
- [Fernandes 1998] P. Fernandes. *Optimização da topologia de estruturas tridimensionais*. Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia Mecânica, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, Lisboa, 1998.

- [Fernandes *et al.* 1999] P. Fernandes, J.M. Guedes e H.C. Rodrigues. Topology optimization of three-dimensional linear elastic structures with a constraint on “perimeter”. *Computers & Structures*, **73**(6):583–594, 1999.
- [Fleury 1989] C. Fleury. CONLIN: an efficient dual optimizer based on convex approximation concepts. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **1**(2):81–89, 1989.
- [Fleury e Braibant 1986] C. Fleury e V. Braibant. Structural optimization: a new dual method using mixed variables. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **23**(3):409–428, 1986.
- [Flynn 1966] M.J. Flynn. Very high-speed computing systems. *Proceedings of the IEEE*, **54**(12):1901–1909, 1966.
- [Flynn 1972] M.J. Flynn. Some computer organizations and their effectiveness. *IEEE Transactions on Computers*, **C-21**(9):948–960, 1972.
- [Foley 2007] C.M. Foley. *Structural optimization using evolutionary computation*. In Optimization of structural and mechanical systems, J.S. Arora (Ed.), pp. 59–119, World Scientific Publishing Co. Inc., Singapura, 2007.
- [Folgado *et al.* 1995] L. Folgado, H.C. Rodrigues e J.M. Guedes. *Layout design of plate reinforcements with a buckling load criterion*. Actas do WCSMO-1 — First World Congress in Structural and Multidisciplinary Optimization, N. Olhoff e G. I.N. Rozvany (Eds.), pp. 659–668, Goslar, Alemanha, Maio, 1995.
- [Foster e Kesselman 1999] I. Foster e C. Kesselman. *The grid: blueprint for a new computing infrastructure*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., São Francisco, Califórnia, EUA, 1999.
- [Fourier 1822] J. Fourier. *Théorie analytique de la chaleur*. Firmin Didot, Père et Fils, Paris, França, 1822.
- [Frischknecht *et al.* 2011] B.D. Frischknecht, D.L. Peters e P.Y. Papalambros. Pareto set analysis: local measures of objective coupling in multiobjective design optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **43**(5):617–630, 2011.
- [Fung e Tong 2001] Y. Fung e P. Tong. *Classical and computational solid mechanics*. Advanced Series in Engineering Science — Vol. 1, World Scientific Publishing Co Inc., Singapura, 2001.
- [Galan *et al.* 2001] M.J. Galan, F. García, L. Álvarez, A. Ocón e E. Rubio. ‘Beowulf cluster’ for high-performance computing tasks at the university: a very profitable investment. *High performance computing at low price*. Actas da EUNIS’01 — 7<sup>th</sup> International Conference of European University Information Systems, pp. 328–335, Berlim, Alemanha, Março, 2001.
- [Gao e Zhang 2010] T. Gao e W. Zhang. Topology optimization involving thermo-elastic stress loads. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **42**(5):725–738, 2010.
- [Gibiansky e Torquato 1997] L.V. Gibiansky e S. Torquato. Thermal expansion of isotropic multiphase composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**(7):1223–1252, 1997.
- [Golub e O’Leary 1989] G.H. Golub e D.F. O’Leary. Some history of the conjugate gradient and Lanczos methods. *SIAM Review*, **31**:50–102, 1989.
- [Graham 1999] P. Graham. *OpenMp: a parallel programming model for shared-memory architectures*. Technical Report, EPCC — Edinburgh Parallel Computing Centre, Universidade de Edimburgo, Escócia, Reino Unido, 1999.

- [Grama *et al.* 1993] A.Y. Grama, A. Gupta e V. Kumar. Isoefficiency: measuring the scalability of parallel algorithms and architectures. *IEEE Parallel & Distributed Technology: Systems & Applications*, **1**(3):12–21, 1993.
- [Grama *et al.* 2003] A. Grama, A. Gupta, G. Karypis e V. Kumar. Introduction to parallel computing. 2.<sup>a</sup> Ed., Pearson/Addison Wesley, Harlow, Reino Unido, 2003.
- [Grierson 2008] D. Grierson. Pareto multi-criteria decision making. *Advanced Engineering Informatics*, **22**(3):371–384, 2008.
- [Groenwold e Etman 2009] A.A. Groenwold e L.F.P. Etman. A simple heuristic for gray-scale suppression in optimality criterion-based topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **39**(2):217–225, 2009.
- [Gropp e Lusk 2005] W. Gropp e E. Lusk. *Installation and user's Guide to MPICH, a portable implementation of MPI version 1.2.7 – the chp4 device for workstation networks*. Technical Report, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, Universidade de Chicago, 2005.
- [Gropp e Smith 1993] W.D. Gropp e B. Smith. *Chameleon parallel programming tools users manual*. Technical Report ANL-93/23, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, EUA, Março, 1993.
- [Gropp *et al.* 2003] W. Gropp, E. Lusk e T. Sterling. *Beowulf cluster computing with linux*. 2.<sup>a</sup> Ed., The MIT Press Series in Scientific and Engineering Computation, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, EUA, 2003.
- [Guedes e Kikuchi 1990] J.M. Guedes e N. Kikuchi. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **83**(2):143–198, 1990.
- [Guedes *et al.* 2003] J.M. Guedes, H.C. Rodrigues e M.P. Bendsøe. A material optimization model to approximate energy bounds for cellular materials under multiload conditions. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **25**(5-6):446–452, 2003.
- [Guedes *et al.* 2006] J.M. Guedes, E. Lubrano, H.C. Rodrigues e S. Turteltaub. *Hierarchical optimization of material and structure for thermal transient problems*. IUTAM Symposium on Topological Design Optimization of Structures, Machines and Materials — Solid Mechanics and its Applications, M.P. Bendsøe, N. Olhoff, O. Sigmund (Eds.), Vol. 137, pp. 527–536, Springer, 2006.
- [Guest e Prévost 2007] J.K. Guest e J.H. Prévost. Design of maximum permeability material structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **196**(4-6):1006–1017, 2007.
- [Gustafson 1988] J.L. Gustafson. Reevaluating Amdahl's law. *Communications of the ACM*, **31**(5):532–533, 1988.
- [Gutman *et al.* 1981] G.A. Gutman, H.M. Rice e A. Maewall. *Thermomechanical analysis of graphite/metal matrix composites*. Relatório técnico, 1981.
- [Haber *et al.* 1996] R.B. Haber, C.S. Jog e M.P. Bendsøe. A new approach to variable-topology shape design using a constraint on perimeter. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **11**(1-2):1–12, 1996.
- [Haftka e Gürdal 1992] R.T. Haftka e Z. Gürdal. *Elements of structural optimization*. 3.<sup>a</sup> Ed., Kluwer Academic Press, Dordrecht, Países Baixos, 1992.

- [Haftka e Sobieszczanski-Sobieski 2001] R.T. Haftka e J. Sobieszczanski-Sobieski. *Structural optimization: history*. In Encyclopedia of Optimization, C.A. Floudas e P.M. Pardalos (Eds.), Vol. 5, pp. 379–382, Springer, Nova Iorque, EUA, 2001.
- [Händler 1977] W. Händler. *The impact classification schemes on computer architecture*. Actas da 1977 International Conference on Parallel Processing, Institute of Electrical and Electronics Engineers, pp. 7–15, São Francisco, Califórnia, EUA, Agosto, 1977.
- [Har e Fulton 2003] J. Har e R.E. Fulton. A parallel finite element procedure for contact-impact problems. *Engineering with Computers*, **19**(2-3):67–84, 2003.
- [Hashin 1962] Z. Hashin. The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, **29**:143–150, 1962.
- [Hashin e Rosen 1964] Z. Hashin e B.W. Rosen. The elastic moduli of fiber reinforced materials. *Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME*, **31**:223–232, 1964.
- [Hashin e Shtrikman 1962] Z. Hashin e S. Shtrikman. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **10**(4):335–342, 1962.
- [Hashin e Shtrikman 1963] Z. Hashin e S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**:127–140, 1963.
- [Hassani e Hinton 1998a] B. Hassani e E. Hinton. A review of homogenization and topology optimization II – analytical and numerical solution of homogenization equations. *Computers & Structures*, **69**(6):719–738, 1998.
- [Hassani e Hinton 1998b] B. Hassani e E. Hinton. A review of homogenization and topology optimization I – homogenisation theory for media with periodic structure. *Computers & Structures*, **69**(6):707–717, 1998.
- [Hassani e Hinton 1998c] B. Hassani e E. Hinton. A review of homogenization and topology optimization III – topology optimization using optimality criteria. *Computers & Structures*, **69**(6):739–756, 1998.
- [Hassani e Hinton 1999] B. Hassani e E. Hinton. *Homogenization and structural topology optimization: theory, practice, and software*. Springer Verlag, Londres, Reino Unido, 1999.
- [Hennessy e Patterson 2002] J.L. Hennessy e D.A. Patterson. *Computer architecture: a quantitative approach*. 3.<sup>a</sup> Ed., Morgan Kaufmann Publishers, Inc., São Francisco, Califórnia, EUA, 2002.
- [Hestenes 1969] M.R. Hestenes. Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, **4**(5):303–320, 1969.
- [Hestenes e Stiefel 1952] M.R. Hestenes e E.L. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **49**:409–436, 1952.
- [Hill 1963] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**:357–372, 1963.
- [Hintz e Tate 1972] R.G. Hintz e D.P. Tate. *Control data STAR-100 processor design*. Actas da Comcon 72 — IEEE Computer Society International Conference, pp. 1–4, Boston, Massachusetts, EUA, Setembro, 1972.



- [Hlavička 1997] J. Hlavička. *Computer architecture*. České Vysoké Učení Technické v Praze — Czech Technical University in Prague, Universidade de Praga, Praga, República Checa, 1997.
- [Hockney 1987] R.W. Hockney. *Classification and evaluation of parallel computer systems*. Atas do 4<sup>th</sup> International DFVLR Seminar on Foundations of Engineering Sciences: Parallel Computing in Science and Engineering, Lecture Notes in Computer Science, R. Dierstein, D. Müller-Wichards e H.M. Wacker (Eds.), Vol. 295, pp. 13–25, Springer-Verlag, Londres, Reino Unido, 1987.
- [Hollister e Kikuchi 1992] S.J. Hollister e N. Kikuchi. A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites. *Computational Mechanics*, **10**:73–95, 1992.
- [Hollister *et al.* 1991] S.J. Hollister, D.P. Fyhrie, K.J. Jepsen e S.A. Goldstein. Applications of homogenization theory to the study of trabecular bone mechanics. *Journal of Biomechanics*, **24**(9):825–839, 1991.
- [Houstis e Rice 2000] E.N. Houstis e J.R. Rice. Future problem solving environments for computational science. *Mathematics and Computers in Simulation*, **54**(4-5):243–257, 2000.
- [Hsiung e El-Sayed 1993] C.K. Hsiung e M.E.M. El-Sayed. Parallel structural optimization on Cray X-MP. *Advances in Engineering Software*, **17**(3):135–139, 1993.
- [Huang *et al.* 2008] Y. Huang, K.K. Jin e S.K. Ha. Effects of fiber arrangement on mechanical behavior of unidirectional composites. *Journal of Composite Materials*, **42**(18):1851–1871, 2008.
- [Hvejsel e Lund 2011] C.F. Hvejsel e E. Lund. Material interpolation schemes for unified topology and multi-material optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **43**(6):811–825, 2011.
- [Hwang 1993] K. Hwang. *Advanced computer architecture: parallelism, scalability, programmability*. McGraw-Hill, Nova Iorque, EUA, 1993.
- [Hwang e Briggs 1984] K. Hwang e F.A. Briggs. *Computer architecture and parallel processing*. McGraw-Hill Book Company, Nova Iorque, EUA, 1984.
- [Ibbett e Topham 1989] R.N. Ibbett e N.F. Topham. *Architecture of high-performance computers*. Vol. II, Macmillan, Londres, Reino Unido, 1989.
- [Irons e Ahmad 1980] B. Irons e S. Ahmad. *Techniques of finite elements*. Ellis Horwood Ltd., Nova Iorque, EUA, 1980.
- [Jacobsen 1998] J. Jacobsen. Generalized shape optimization of three-dimensional structures using materials with optimum microstructures. *Mechanics of Materials*, **28**(1-4):207–225, 1998.
- [Johnson 1988] E.E. Johnson. Completing an MIMD multiprocessor taxonomy. *ACM SIGARCH Computer Architecture News*, **16**(3):44–47, 1988.
- [Kang *et al.* 2010] H. Kang, C.Y. Lin e S.J. Hollister. Topology optimization of three dimensional tissue engineering scaffold architectures for prescribed bulk modulus and diffusivity. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **42**(4):633–644, 2010.
- [Kanouté *et al.* 2009] P. Kanouté, D.P. Boso, J.L. Chaboche e B.A. Schrefler. Multiscale methods for composites: a review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, **16**(1):31–75, 2009.

- [Karypis e Kumar 1998] G. Karypis e V. Kumar. *METIS: a software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices, version 4.0*. Technical Report, Universidade de Mineápolis, Mineápolis, EUA, 1998.
- [Kaw e Kalu 2011] A.K. Kaw e E.E. Kalu. *Numerical methods with applications*. 2.<sup>a</sup> Ed., Lulu.com, 2011.
- [Kawamoto e Kyoya 1993] T. Kawamoto e T. Kyoya. *Some applications of homogenization method in rock mechanics*. Actas do Impact of Computational Mechanics on Engineering Problems Seminar, V. Murti e V.A. Pulmano (Eds.), pp. 63–70, Taylor & Francis, 1993.
- [Kawamoto *et al.* 2011] A. Kawamoto, T. Matsumori, S. Yamasaki, T. Nomura, T. Kondoh e S. Nishiwaki. Heaviside projection based topology optimization by a PDE-filtered scalar function. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **44**(1):19–24, 2011.
- [Kayvantash e Thierauf 1991] K. Kayvantash e G. Thierauf. A concurrent and parallel processing methodology for the analysis, design and optimization of coupled thermal/structural interaction based on domain decomposition. *Computing Systems in Engineering*, **2**(5-6):497–507, 1991.
- [Kelley 1995] C.T. Kelley. *Iterative methods for linear and nonlinear equations*. SIAM — Society for Industrial and Applied Mathematics, Filadélfia, EUA, 1995.
- [Kenaga *et al.* 1987] D. Kenaga, J.F. Doyle e C.T. Sun. The characterization of boron/aluminum composite in the nonlinear range as an orthotropic elastic-plastic material. *Journal of Composite Materials*, **21**(6):516–531, 1987.
- [Kernighan e Ritchie 1978] B.W. Kernighan e D.M. Ritchie. *The C programming language*. 1.<sup>a</sup> Ed., Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérsea, EUA, 1978.
- [Khot 1981] N.S. Khot. Algorithms based on optimality criteria to design minimum weight structures. *Engineering Optimization*, **5**(2):73–90, 1981.
- [Kim 2000] Y. Kim. Multi-resolution multi-scale topology optimization – a new paradigm. *International Journal of Solids and Structures*, **37**(39):5529–5559, 2000.
- [Kim e Im 2003] S.Y. Kim e Y.T. Im. Parallel processing of 3D rigid visco-plastic finite element analysis using domain decomposition and modified block Jacobi preconditioning technique. *Journal of Materials Processing Technology*, **134**:254–264, 2003.
- [Kim *et al.* 2004] T.S. Kim, J.E. Kim e Y.Y. Kim. Parallelized structural topology optimization for eigenvalue problems. *International Journal of Solids and Structures*, **41**(9-10):2623–2641, 2004.
- [Kirsch *et al.* 2002] U. Kirsch, M. Kocvara e J. Zowe. Accurate reanalysis of structures by a preconditioned conjugate gradient method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **55**(2):233–251, 2002.
- [Klein e Young 2010] P.N. Klein e N.E. Young. *Approximation algorithms for NP-hard optimization problems*. In Algorithms and theory of computation handbook, M.J. Atallah (Ed.), pp. 34.1–34.20, Applied Algorithms and Data Structures series, Chapman & Hall/CRC, CRC Press, EUA, 2010.
- [Korab *et al.* 2002] J. Korab, P. Stefanik, S. Kaveckı, P. Sebo e G. Korb. Thermal conductivity of unidirectional copper matrix carbon fibre composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, **33**(4):577–581, 2002.

- [Krishnamurthy 1990] E.V. Krishnamurthy. *Parallel processing: principles and practice*. Addison-Wesley Longman Publishing Company, Inc., Boston, Massachusetts, EUA, 1990.
- [Kung e Leiserson 1979] H.T. Kung e C.E. Leiserson. *Systolic arrays (for VLSI)*. Sparse Matrix Proceedings 1978, I.S. Duff e G.W. Stewart (Eds.), pp. 256–282, Knoxville, Tennessee, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1979.
- [Kung *et al.* 1987] S.Y. Kung, S.C. Lo, S.N. Jean e J.N. Hwang. Wavefront array processors — concept to implementation. *IEEE Computer*, **20**(7):18–33, 1987.
- [Lefik e Shrefler 1994] M. Lefik e B.A. Shrefler. 3-D finite element analysis of composite beams with parallel fibres, based on homogenization theory. *Computational Mechanics*, **14**:2–15, 1994.
- [Lene e Paumelle 1992] F. Lene e P. Paumelle. micromechanisms of damage in woven composite. *Composite Material Technology*, **45**:97–105, 1992.
- [Leopold 2001] C. Leopold. *Parallel and distributed computing: a survey of models, paradigms and approaches*. John Wiley & Sons, Nova Iorque, EUA, 2001.
- [Lewiński e Rozvany 2007] T. Lewiński e G.I.N. Rozvany. Exact analytical solutions for some popular benchmark problems in topology optimization II: three-sided polygonal supports. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **33**(4-5):337–349, 2007.
- [Lewiński e Rozvany 2008] T. Lewiński e G.I.N. Rozvany. Exact analytical solutions for some popular benchmark problems in topology optimization III: L-shaped domains. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **35**(2):165–174, 2008.
- [Lewis *et al.* 1996] R.W. Lewis, K. Morgan, H.R. Thomas e K.N. Seetharamu. *The finite element method in heat transfer analysis*. John Wiley & Sons Inc., Chichester, Reino Unido, 1996.
- [Li 2008] S. Li. Boundary conditions for unit cells from periodic microstructures and their implications. *Composites Science and Technology*, **68**(9):1962–1974, 2008.
- [Li *et al.* 1999] Q. Li, G.P. Steven e Y.M. Xie. Displacement minimization of thermoelastic structures by evolutionary thickness design. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **179**(3):361–378, 1999.
- [Li *et al.* 2010] D. Li, X. Zhang, Y. Guan e J. Zhan. *Topology optimization of thermo-mechanical continuum structure*. Actas da 2010 IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics, pp. 403–408, Montreal, Canadá, Julho, 2010.
- [Lions 1981] J.L. Lions. *Some methods in the mathematical analysis of systems and their control*. Gordon and Breach Science Publishers Inc. e Science Press, Pequim, China, 1981.
- [Lipovski e Malek 1987] G.J. Lipovski e M. Malek. *Parallel computing: theory and comparisons*. John Wiley & Sons, Nova Iorque, EUA, 1987.
- [Lonnberg *et al.* 1998] B. Lonnberg, T. Lundstrom e J. Bauer. Thermal expansion of  $\beta$ -rhombohedral boron. *Journal of Alloys and Compounds*, **267**(1-2):54–58, 1998.
- [Luenberger e Ye 2008] D.G. Luenberger e Y. Ye. *Linear and nonlinear programming*. 3.<sup>a</sup> Ed., Springer Science + Business Media, Nova Iorque, EUA, 2008.
- [Ma *et al.* 1995] Z.D. Ma, N. Kikuchi e H.C. Cheng. Topology design for vibrating structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **121**(1-4):259–280, 1995.



- [Mahdavi *et al.* 2006] A. Mahdavi, R. Balaji, M. Frecker e E.M. Mockensturm. Topology optimization of 2D continua for minimum compliance using parallel computing. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **32**(2):121–132, 2006.
- [Marchi e Massaioli 1997] C.A. Marchi e F. Massaioli. The integration of SIMD and MIMD: a new line of development for MPP systems. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research - Section A*, **389**:42–46, 1997.
- [Martin *et al.* 1991] B.E. Martin, C.H. Pedersen e J. Bedford-Roberts. An object-based taxonomy for distributed computing systems. *IEEE Computer*, **24**(8):17–27, 1991.
- [Martins 1999] E.F.V. Martins. *Multiprocessador de passagem de mensagens*. Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia Electrotécnica, Departamento de Electrónica e Comunicações, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 1999.
- [Mavko *et al.* 1998] G. Mavko, T. Mukerji e J. Dvorkin. *The rock physics handbook – tools for seismic analysis in porous media*. Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1998.
- [Maxwell 1870] J.C. Maxwell. On reciprocal figures, frames and diagrams of forces. *Transactions of the Royal Society of Edinburgh*, Vol. XXVI, pp. 1–40, 1870.
- [Maxwell 1873] J.C. Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. Clarendon Press, Oxford, Reino Unido, 1873.
- [Messac e Mullur 2007] A. Messac e A.A. Mullur. *Multiobjective optimization: concepts and methods*. In Optimization of structural and mechanical systems, J.S. Arora (Ed.), pp. 121–147, World Scientific Publishing Co. Inc., Singapura, 2007.
- [Meurant 1999] G. Meurant. *Computer solution of large linear systems*. In Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 28, D.N., Ciarlet, P.G., Lions, P.L., van der Vorst, H.A. (Eds.), North Holland, Elsevier Science B.V., Amesterdão, Países Baixos, 1999.
- [Michell 1904] A.G.M. Michell. The limits of economy of material in frame structures. *Philosophical Magazine*, **8**(Series 6):589–597, 1904.
- [MPIF 1994] Message Passing Interface forum. MPI: a message-passing interface standard. *The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing*, **8**(3-4):159–416, 1994.
- [MPIF 1995] Message Passing Interface forum. *MPI: a message-passing interface standard*. Technical Report, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, EUA, Junho, 1995.
- [MPIF 1997] Message Passing Interface forum. *MPI-2: extensions to the message-passing interface*. Technical Report, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, EUA, Julho., 1997.
- [MPIF 2008] Message Passing Interface forum. *MPI: a message-passing interface standard, version 1.3*. Technical Report, Universidade do Tennessee, Knoxville, Tennessee, EUA, Maio, 2008.
- [Murat e Tartar 1997] F. Murat e L. Tartar. *H: convergence*. Topics in the Mathematical Modelling of Composite Materials, Series Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, Vol. 31, pp. 21–43, Birkhäuser, Boston, EUA, 1997.
- [Murdocca e Heuring 2000] M.J. Murdocca e V.P. Heuring. *Principles of computer architecture*. Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, Nova Jérσία, EUA, 2000.
- [Murphy e Goasguen 2010] M. Murphy e S. Goasguen. Virtual organization clusters: self-provisioned clouds on the grid. *Future Generation Computer Systems*, **26**(8):1271–1281, 2010.

- [Nishiwaki *et al.* 1998] S. Nishiwaki, M.I. Frecker, S. Min e N. Kikuchi. Topology optimization of compliant mechanisms using the homogenization method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **42**(3):535–559, 1998.
- [Noor 1997] A.K. Noor. New computing systems and future high-performance computing environment and their impact on structural analysis and design. *Computers & Structures*, **64**(1-4):1–30, 1997.
- [Oñate 1995] E. Oñate. *Cálculo de estruturas por el método de elementos finitos — Análisis Estático Lineal*. 2.<sup>a</sup> Ed., CIMNE, Barcelona, Espanha, 1995.
- [Oden 2003] J. Oden. Research directions in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**(7-8):913–922, 2003.
- [Oleinik *et al.* 1992] O.A. Oleinik, A.S. Shamaev e G.A. Yosifian. *Mathematical problems in elasticity and homogenization*. Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 26, North-Holland Publishing Co., Amesterdão, Países Baixos, 1992.
- [Olhoff e Bendsøe 1991] N. Olhoff e M.P. Bendsøe. On CAD-integrated structural topology and design optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **89**(1-3):259–279, 1991.
- [Olhoff *et al.* 1993] N. Olhoff, J. Thomsen e L. Krogh. *Bi-material topology optimization*. Actas do Structural Optimization 93: The World Congress on Optimal Design of Structural Systems, J. Herskovits (Ed.), pp. 327–336, Rio de Janeiro, Brasil, Agosto, 1993.
- [Oliveira *et al.* 2008] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. *Prediction of mechanical properties of composite materials by asymptotic expansion homogenisation*. Computational Methods in Applied Sciences, Vol. 10 - Mechanical Response of Composites - ECCOMAS Series, P.P. Camanho, C.G. Dávila, S.T. Pinho, J.J.C. Remmers (Eds.), pp. 223–242, Springer + Business Media B.V., Dordrecht, Países Baixos, 2008.
- [Oliveira *et al.* 2009a] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part II: Finite element procedures and multiscale applications. *Computational Materials Science*, **45**(4):1081–1096, 2009.
- [Oliveira *et al.* 2009b] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. *Aplicações de homogeneização por expansão assintótica com células unitárias hexagonais*. Actas do Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2009, Barcelona, Espanha, Junho, 2009.
- [Oliveira *et al.* 2010a] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. *Asymptotic expansion homogenisation of topology optimisation unit-cells* (comunicação em painel). Actas da EngOpt 2010 — 2nd International Conference on Engineering Optimization, Lisboa, Portugal, Setembro, 2010.
- [Oliveira *et al.* 2010b] J.A. Oliveira, J. Pinho-da-Cruz e F. Teixeira-Dias. *Stress- and strain-based multifreedom constraints for periodic media optimisation*. Actas da EngOpt 2010 — 2nd International Conference on Engineering Optimization, Lisboa, Portugal, Setembro, 2010.
- [Ortega 1988] J.M. Ortega. *Introduction to parallel and vector solution of linear systems*. Frontiers of Computer Science, Plenum Publishing Co., Nova Iorque, EUA, 1988.
- [Palin 2007] M.F. Palin. *Técnicas de decomposição de domínio em computação paralela para simulação de campos eletromagnéticos pelo método dos elementos finitos*. Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Elétrica, Área de Sistemas de Potência, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2007.

- [Pantz e Trabelsi 2007] O. Pantz e K. Trabelsi. Simultaneous shape, topology, and homogenized properties optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **34**(4):361–365, 2007.
- [Pareto 1896] V. Pareto. *Cours d’economie politique*. Vols. A e 2, F. Rouge, Lausanne, Suíça, 1896.
- [Parhami 1999] B. Parhami. *Introduction to parallel processing: algorithms and architectures*. Plenum, Nova Iorque, EUA, 1999.
- [Pedersen e Pedersen 2010] P. Pedersen e N.L. Pedersen. Strength optimized designs of thermoelastic structures. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **42**(5):681–691, 2010.
- [Petersson 1999] J. Petersson. Some convergence results in perimeter-controlled topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **171**(1-2):123–140, 1999.
- [Pindera et al. 2009] M. Pindera, H. Khatam, A.S. Drago e Y. Bansal. Micromechanics of spatially uniform heterogeneous media: a critical review and emerging approaches. *Composites Part B: Engineering*, **40**(5):349–378, 2009.
- [Pinho-da-Cruz 2007] J. Pinho-da-Cruz. *Caracterização termomecânica de materiais multifásicos utilizando procedimentos de homogeneização*. Dissertação de Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal, 2007.
- [Pinho-da-Cruz et al. 2009a] J. Pinho-da-Cruz, J.A. Oliveira e F. Teixeira-Dias. Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part I: Mathematical formulation and finite element modelling. *Computational Materials Science*, **45**(4):1073–1080, 2009.
- [Pinho-da-Cruz et al. 2009b] J. Pinho-da-Cruz, J.A. Oliveira e F. Teixeira-Dias. Homogeneização de propriedades de materiais compósitos em termoelasticidade linear. *Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica*, **13**(2):3–23, 2009.
- [Pitanga 2004] M. Pitanga. *Construindo supercomputadores com linux*. 2.<sup>a</sup> Ed., Brasport, Rio de Janeiro, Brasil, 2004.
- [Poisson 1824] S.D. Poisson. *Second mémoire sur la théorie du magnétisme*. Académie Royale des Sciences de l’Institut de France, **5**:488–533, 1824.
- [Prager 1968] W. Prager. Optimality criteria in structural design. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **61**(3): 794–796, 1968.
- [Quarteroni et al. 2000] A. Quarteroni, R. Sacco e F. Saleri. *Numerical mathematics*. Texts in Applied Mathematics, Vol. 37, Springer-Verlag, Nova Iorque, EUA, 2000.
- [Radajewski e Eadline 1998] J. Radajewski e D. Eadline. *The Beowulf HOWTO*. Linux Documentation Project, <http://ibiblio.org/pub/Linux/docs/HOWTO/archive/Beowulf-HOWTO.html> (consultado em 2007), 1998.
- [Rajan et al. 2004] S.D. Rajan, A.D. Belegundu, D. Lee, A.S. Damle e J.S. Ville. *Finite element analysis & design optimization in a distributed computing environment*. Actas da 10th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference, Albany, Nova Iorque, EUA, Setembro, 2004.
- [Ramos e Leal 2002] U. Ramos e R. Leal. *Algoritmos genéticos na optimização topológica de estruturas*. Actas do V Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería, V.J.M Goicolea, C.M. Soares, M. Pastor e G. Bugeda (Eds.), SEMNI, Madrid, Espanha, Junho, 2002.
- [Rand e Rovenski 2005] O. Rand e V. Rovenski. *Analytical methods in anisotropic elasticity with symbolic computational tools*. Birkhäuser, Boston, EUA, 2005.

- [Rao 2009] S.S. Rao. *Engineering optimization: theory and practice*. 4.<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, Inc., Nova Jérsea, EUA, 2009.
- [Rayleigh 1892] L. Rayleigh. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium. *Philosophical Magazine*, **34**(5):481–502, 1892.
- [Reed e Tour 2000] M.A. Reed e J.M. Tour. Computing with molecules. *Scientific American Magazine*, Junho, 2000.
- [Reid 1971] J. Reid. *On the Method of conjugate gradients for the solution of large sparse systems of linear equations*. Actas da Oxford Conference of the Institute of Mathematics and its Applications: Large Sparse Sets of Linear Equations, J.K. Reid (Ed.), pp. 231–254, Academic Press, Londres, Reino Unido, 1971.
- [Reuss 1929] A. Reuss. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, **9**:49–58, 1929.
- [Rizzo 1991] A.R. Rizzo. Estimating errors in FE analyses. *Mechanical Engineering — CIME — Computers in Mechanical Engineering*, **113**(5):61–63, 1991.
- [Rodrigues 2006] H.C. Rodrigues. *Topology optimization of structures: applications in the simulation and design of cellular materials*. Computational Methods in Engineering & Science, Z. H. Yao e M.W. Yuan (Eds.) — proceedings of Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science X, Sanya, China, Agosto, 2006.
- [Rodrigues e Fernandes 1995] H.C. Rodrigues e P. Fernandes. A material based model for topology optimization of thermoelastic structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **38**(12):1951–1965, 1995.
- [Rodrigues et al. 1999] H.C. Rodrigues, C. Jacobs, J.M. Guedes e M.P. Bendsøe. *Global and local material optimization models applied to anisotropic bone adaptation*. IUTAM Symposium on Synthesis in Bio Solid Mechanics — Solid Mechanics and its Applications, P. Pedersen e M.P. Bendsøe (Eds.), Vol. 69, pp. 209–220, Kluwer Academic Publishers, Países Baixos, 1999.
- [Rodrigues et al. 2002] H.C. Rodrigues, J.M. Guedes e M.P. Bendsøe. Hierarchical optimization of material and structure. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **24**(1):1–10, 2002.
- [Rozvany 1998] G.I.N. Rozvany. Exact analytical solutions for some popular benchmark problems in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **15**(1):42–48, 1998.
- [Rozvany 2001] G.I.N. Rozvany. Aims, scope, methods, history and unified terminology of computer-aided topology optimization in structural mechanics. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **21**(2):90–108, 2001.
- [Rozvany 2009] G.I.N. Rozvany. A critical review of established methods of structural topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **37**(3):217–237, 2009.
- [Rozvany e Querin 2002] G.I.N. Rozvany e O.M. Querin. Combining ESO with rigorous optimality criteria. *International Journal of Vehicle Design*, **28**(4):294–299, 2002.
- [Rozvany et al. 1992] G.I.N. Rozvany, M. Zhou e T. Birker. Generalized shape optimization without homogenization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **4**(3–4):250–252, 1992.

- [Rozvany *et al.* 2006] G.I.N. Rozvany, V. Pomezanski, O.M. Querin, Z. Gaspar e J. Logo. *Some basic issues of topology optimization*. IUTAM Symposium on Topological Design Optimization of Structures, Machines and Materials — Solid Mechanics and its Applications, M.P. Bendsøe, N. Olhoff, O. Sigmund (Eds.), Vol. 137, pp. 77–86, Springer, 2006.
- [Rus *et al.* 2003] P. Rus, B. Stok e N. Mole. Parallel computing with load balancing on heterogeneous distributed systems. *Advances in Engineering Software*, **34**(4):185–201, 2003.
- [Saad 2003] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. 2.<sup>a</sup> Ed., SIAM, Filadélfia, EUA, 2003.
- [Saint-Georges *et al.* 1996] P. Saint-Georges, G. Warzee, R. Beauwens e Y. Notay. High-performance PCG solvers for FEM structural analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**(8):1313–1340, 1996.
- [Sanchez-Hubert e Sanchez-Palencia 1992] J. Sanchez-Hubert e E. Sanchez-Palencia. *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l’homogénéisation: application à la mécanique des milieux continus*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise, Masson, Paris, França, 1992.
- [Sanchez-Palencia 1970] E. Sanchez-Palencia. Solutions périodiques par rapport aux variables d’espace et applications. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences – Série A-B*, **271**:A1129–A1132, 1970.
- [Sanchez-Palencia 1980] E. Sanchez-Palencia. *Non-homogeneous media and vibration theory*. Lectures Notes in Physics, Vol. 127, Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, 1980.
- [Schmit 1960] L.A. Schmit. *Structural design by systematic synthesis*. Actas da 2<sup>nd</sup> Conference on Electronic Computation, pp. 105–122, American Society of Civil Engineers, Nova Iorque, EUA, 1960.
- [Schwarz 1870] H.A. Schwarz. Ueber einen grenzübergang durch alternirendes verfahren. *Vierteljahresschrift der Naturforschenden Gesellschaft in Zürich*, **15**:272–286, 1870.
- [Sen *et al.* 2011] A. Sen, B. Aksanli e M. Bozkurt. Speeding up cycle based logic simulation using graphics processing units. *International Journal of Parallel Programming*, **69**:639–661, 2011.
- [Shiers 2009] J. Shiers. Grid today, clouds on the horizon. *Computer Physics Communications*, **180**(4):559–563, 2009.
- [Shore 1973] J.E. Shore. Second thoughts on parallel processing. *Computers & Electrical Engineering*, **1**(1):95–109, 1973.
- [Sigmund 1994] O. Sigmund. Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem. *International Journal of Solids and Structures*, **31**(17):2313–2329, 1994.
- [Sigmund 1997] O. Sigmund. On the design of compliant mechanisms using topology optimization. *Mechanics Based Design of Structures and Machines*, **25**(4):493–524, 1997.
- [Sigmund 2000] O. Sigmund. A new class of extremal composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **48**(2):397–428, 2000.
- [Sigmund 2001] O. Sigmund. A 99 line topology optimization code written in Matlab. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **21**(2):120–127, 2001.
- [Sigmund 2007] O. Sigmund. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **33**(4-5):401–424, 2007.



- [Sigmund 2009] O. Sigmund. Manufacturing tolerant topology optimization. *Acta Mechanica Sinica*, **25**(2):227–239, 2009.
- [Sigmund e Petersson 1998] O. Sigmund e J. Petersson. Numerical instabilities in topology optimization: a survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima. *Structural Optimization*, **16**(1):68–75, 1998.
- [Sigmund e Torquato 1997] O. Sigmund e S. Torquato. Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**(6):1037–1067, 1997.
- [Siirola 2009] J.D. Siirola. Current trends in parallel computation and the implications for modeling and optimization. *Computer Aided Chemical Engineering*, **27**:139–141, 2009.
- [Sikiotis e Saouma 1988] E.S. Sikiotis e V.E. Saouma. Parallel structural optimization on a network of computer workstations. *Computers & Structures*, **29**(1), 1988.
- [Silva 2010] C.E. Silva. *APOSTILA PMR 5215 – Otimização aplicada ao projeto de sistemas mecânicos*. Relatório técnico, Escola Politécnica da USP, Departamento de Engenharia Mecatrônica e Sistemas Mecânicos, 2010.
- [Silva e Buyya 1999] L.M. Silva e R. Buyya. *Parallel programming models and paradigms*. High Performance Cluster Computing: Programming and Applications, R. Buyya (Ed.), Vol. 2, pp. 4–27, Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, Nova Jérσία, EUA, 1999.
- [Skillicorn 1988] D.B. Skillicorn. A taxonomy for computer architectures. *IEEE Computer*, **21**(11):46–57, 1988.
- [Smith *et al.* 1996] B.F. Smith, P.E. Bjørstad e W.D. Gropp. *Domain decomposition: parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations*. Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 1996.
- [Snyder 1988] L. Snyder. *A taxonomy of synchronous parallel machines*. Actas da International Conference on Parallel Processing — ICCP '88, Vol. 1: Architecture, pp. 281–285, The Pennsylvania State University, Pensilvânia, EUA, Agosto, 1988.
- [Snyder e Wilkerson 1987] H.H. Snyder e R.W. Wilkerson. *A symbolic computation method of analytic solution of the mixed Dirichlet-Neumann-Robin problem for Laplace's equation*. Actas da 15<sup>th</sup> ACM Annual Conference on Computer Science, pp. 108–113, St. Louis, Missouri, EUA, 1987.
- [Song e Youn 2006] Y.S. Song e J.R. Youn. Modeling of Effective Elastic Properties for Polymer Based Carbon Nanotube Composites. *Polymer*, **47**(5):1741–1748, 2006.
- [Sonzogni *et al.* 2002] V.E. Sonzogni, A.M. Yommi, N.M. Nigro e M.A. Storti. A parallel finite element program on a Beowulf cluster. *Advances in Engineering Software — Engineering Computational Technology*, **33**(7-10):427–443, 2002.
- [Spagnolo 1968] S. Spagnolo. Sulla convergenza di soluzioni di equazioni paraboliche ed ellittiche. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa*, **22**(3):571–597, 1968.
- [Spector 2000] D.H.M. Spector. Building linux clusters. 1.<sup>a</sup> Ed., O'Reilly & Associates Inc., Sebastpool, EUA, 2000.
- [Stathis 2004] P.T. Stathis. *Sparse matrix vector processing formats*. Dissertação de Tese de Doutoramento em Engenharia de Computadores, Universidade de Delft, Delft, Países Baixos, 2004.
-

- [Sterling *et al.* 1995] T. Sterling, D.J. Becker, C. Park, J.E. Dorband, U.A. Ranawake e C.V. Packer. *Beowulf: a parallel workstation for scientific computation*. Actas da 1995 International Conference on Parallel Processing – ICPP, Vol. 1 – Architecture, P. Banerjee (Ed.), Urbana-Champaign, Illinois, EUA, pp. 11–14, 1995.
- [Sterling *et al.* 1999] T.L. Sterling, J. Salmon, D.J. Becker e D.F. Savarese. *How to build a Beowulf: a guide to the implementation and application of PC clusters*. The MIT Press series in Scientific and Engineering Computation, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, EUA, 1999.
- [Stolpe e Svanberg 2001a] M. Stolpe e K. Svanberg. An alternative interpolation scheme for minimum compliance topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **22**(2):116–124, 2001.
- [Stolpe e Svanberg 2001b] M. Stolpe e K. Svanberg. On the trajectories of penalization methods for topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **21**(2):128–139, 2001.
- [Stone 1993] H.S. Stone. *High-performance computer architecture*. 3.<sup>a</sup> Ed., Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, EUA, 1993.
- [Storaasli *et al.* 1993] O.O. Storaasli, D.T. Nguyen, M.A. Baddourah e J. Qin. Computational mechanics analysis tools for parallel-vector supercomputers. *Computing Systems in Engineering*, **4**(4-6):349–354, 1993.
- [Sultan 2010] N. Sultan. Cloud computing for education: A new dawn? *International Journal of Information Management*, **30**(2):109–116, 2010.
- [Sun e Chen 1991] C.T. Sun e J.L. Chen. A micromechanical model for plastic behavior of fibrous composites. *Composites Science and Technology*, **40**(2):115–129, 1991.
- [Sun e Vaidya 1996] C.T. Sun e R.S. Vaidya. Prediction of composite properties from a representative volume element. *Composites Science and Technology*, **56**(2):171–179, 1996.
- [Sunderam 1990] V.S. Sunderam. PVM: a framework for parallel distributed computing. *Concurrency: Practice and Experience*, **2**(4):315–339, 1990.
- [SunMS 2009a] *Introduction to cloud computing architecture*. Relatório técnico, Sun Microsystems, 2009.
- [SunMS 2009b] *Open source and cloud computing on-demand, innovative it on a massive scale*. Relatório técnico, Sun Microsystems, 2009.
- [Suquet 1987] P.M. Suquet. *Elements of homogenization theory for inelastic solid mechanics*. Homogenization Techniques for Composite Media, Lectures Notes in Physics, Vol. 272, pp. 193–278, E. Sanchez-Palencia e A. Zaoui (Eds.), Springer-Verlag, Berlim, Alemanha, 1987.
- [Svanberg 1987] K. Svanberg. The method of moving asymptotes — a new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**(2):359–373, 1987.
- [Tabak 1990] D. Tabak. *Multiprocessors*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, Nova Jérícia, EUA, 1990.
- [Tai e Zhao 2003] C.H. Tai e Y. Zhao. Parallel unsteady incompressible viscous flow computations using an unstructured multigrid method. *Journal of Computational Physics*, **192**(1):277–311, 2003.

- [Teixeira-Dias 1999] F. Teixeira-Dias. *Tensões residuais de origem térmica em materiais compósitos de matriz metálica — modelação matemática e estudos numéricos*. Dissertação de Tese de Doutoramento, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal, 1999.
- [Teixeira-Dias *et al.* 2010] F. Teixeira-Dias, J. Pinho-da-Cruz, R.A. Valente e R.J. Sousa. *Método dos elementos finitos — técnicas de simulação numérica em engenharia*. Lidel – Edições técnicas, Lisboa, Portugal, 2010.
- [Terada 1996] K. Terada. *Global-local modeling for composites by the homogenization method*. Dissertação de tese de Doutoramento, Universidade de Michigan, Michigan, EUA, 1996.
- [Terada e Kikuchi 1996] K. Terada e N. Kikuchi. Microstructural design of composites using the homogenization method and digital images. *Materials Science Research International*, **2**(2):65–72, 1996.
- [Tezduyar e Sameh 2006] T. Tezduyar e A. Sameh. Parallel finite element computations in fluid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**(13-16):1872–1884, 2006.
- [Theocaris e Stavroulakis 1998] P.S. Theocaris e G.E. Stavroulakis. Multilevel optimal design of composite structures including materials with negative Poisson’s ratio. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **15**(1):8–15, 1998.
- [Theocaris e Stavroulakis 1999] P. Theocaris e G. Stavroulakis. Optimal material design in composites: An iterative approach based on homogenized cells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **169**(1-2):31–42, 1999.
- [Thomsen 1992] J. Thomsen. Topology optimization of structures composed of one or two materials. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **5**(1-2):108–115, 1992.
- [Thurber e Wald 1975] J.K. Thurber e L.D. Wald. Associative and parallel processors. *ACM Computing Surveys*, **7**(4):215–255, 1975.
- [Tomasi e Manduchi 1998] C. Tomasi e R. Manduchi. *Bilateral filtering for gray and color images*. Actas da Sixth International Conference on Computer Vision (IEEE Cat. No.98CH36271), pp. 839–846, Narosa Publishing House, Bombaim, Índia, Janeiro, 1998.
- [TOP500 2012] *TOP500 list of the world’s top supercomputers*, Top 500 Supercomputer Sites, <http://www.top500.org>, lista de 18 de Junho. 2012.
- [Treleaven *et al.* 1982] P.C. Treleaven, D.R. Brownbridge e R.P. Hopkins. Data-driven and demand-driven computer architecture. *ACM Computing Surveys*, **14**(1):93–143, 1982.
- [Turevsky e Suresh 2011] I. Turevsky e K. Suresh. Efficient generation of pareto-optimal topologies for compliance optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **87**(12):1207–1228, 2011.
- [van der Vorst 2003] H.A. van der Vorst. *Iterative Krylov methods for large linear systems*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Vol. 13, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, 2003.
- [van Dijk *et al.* 2010] N.P. van Dijk, M. Langelaar e F. van Keulen. *Critical study of design parametrization in topology optimization: the influence on local minima*. Actas da EngOpt 2010 — 2nd International Conference on Engineering Optimization, Lisboa, Portugal, Setembro, 2010.



- [Vasan e Raju 2009] A. Vasan e K. Raju. Comparative analysis of simulated annealing, simulated quenching and genetic algorithms for optimal reservoir operation. *Applied Soft Computing*, **9**(1):274–281, 2009.
- [Vasconcelos 1998] P.J.A.B. Vasconcelos. *Paralelização de algoritmos de álgebra linear numérica com aplicação a mecânica de fluidos computacional*. Dissertação de Tese de Doutoramento em Ciências da Engenharia, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, Porto, Portugal, 1998.
- [Vemaganti e Lawrence 2005] K. Vemaganti e W. Lawrence. Parallel methods for optimality criteria-based topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**(34-35):3637–3667, 2005.
- [Venkataraman e Haftka 2004] S. Venkataraman e R.T. Haftka. Structural optimization complexity: what has Moore’s law done for us? *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **28**(6):375–387, 2004.
- [Venkayya 1978] V.B. Venkayya. Structural optimization using optimality criteria: a review and some recommendations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **13**:203–228, 1978.
- [Venkayya 1989] V.B. Venkayya. Computational mechanics optimality criteria: a basis for multidisciplinary design optimization. *Computational Mechanics*, **5**(1):1–21, 1989.
- [Voigt 1889] W. Voigt. Ueber die beziehung zwischen den beiden elastizitätskonstanten isotroper körper. *Annalen der Physik und Chemie (Leipzig)*, **38**:573–587, 1889.
- [Wang et al. 2003] M.Y. Wang, X. Wang e D. Guo. A level set method for structural topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**(1-2):227–246, 2003.
- [Wang et al. 2007] S. Wang, E. Sturler e G.H. Paulino. Large-scale topology optimization using preconditioned Krylov subspace methods with recycling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **69**(12):2441–2468, 2007.
- [Wang et al. 2010] F. Wang, B.S. Lazarov e O. Sigmund. On projection methods, convergence and robust formulations in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **43**(6):767–784, 2010.
- [Watson 1972] W.J. Watson. *The TI ASC, a highly modular and flexible super computer architecture*. Actas da 1972 AFIPS Fall Joint Computer Conference, Vol. 41, pp. 221–228, AFIPS Press, Montvale, Nova Jérsea, EUA, Dezembro, 1972.
- [Watson e Gurd 1982] I. Watson e J.R. Gurd. A practical data flow computer. *IEEE Computer*, **15**(2):51–57, 1982.
- [Whitcomb 1991] J.D. Whitcomb. *Three dimensional stress analysis of plain weave composites*. Composite materials: Fatigue and fracture. Vol. 3 (A92-39001 16-39), pp. 417-438, American Society for Testing and Materials, Filadélfia, EUA, 1991.
- [Whitney e Riley 1966] J.M. Whitney e M.B. Riley. Elastic properties of fiber reinforced composite materials. *AIAA (American Institute of Aeronautics and Astronautics) Journal*, **4**(9):1537–1542, 1966.
- [Wuppalapati et al. 2008] S. Wuppalapati, A.D. Belegundu e A. Aziz. Multicriteria decision making with parallel clusters in structural topology optimization. *Advances in Engineering Software*, **39**(5):416–421, 2008.

- [Xia e Wang 2008] Q. Xia e M.Y. Wang. Topology optimization of thermoelastic structures using level set method. *Computational Mechanics*, **42**(6):837–857, 2008.
- [Xia *et al.* 2003] Z. Xia, Y. Zhang e F. Ellyin. A unified periodical boundary conditions for representative volume elements of composites and applications. *International Journal of Solids and Structures*, **40**(8):1907–1921, 2003.
- [Xicheng e Guixu 1992] W. Xicheng e M. Guixu. A parallel iterative algorithm for structural optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **96**(1):25–32, 1992.
- [Yagawa *et al.* 1997] G. Yagawa, Y. Nakabayashi e H. Okuda. Large-scale finite element fluid analysis by massively parallel processors. *Parallel Computing*, **23**(9):1365–1377, 1997.
- [Yamasaki *et al.* 2010] S. Yamasaki, S. Nishiwaki, T. Yamada, K. Izui e M. Yoshimura. A structural optimization method based on the level set method using a new geometry-based re-initialization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **83**(12):1580–1624, 2010.
- [Yau e Fung 1977] S.S. Yau e H.S. Fung. Associative processor architecture — a survey. *ACM Computing Surveys*, **9**(1):3–27, 1977.
- [Yin e Yang 2001] L. Yin e W. Yang. Optimality criteria method for topology optimization under multiple constraints. *Computers & Structures*, **79**(20-21):1839–1850, 2001.
- [Yoon e Kim 2005] G.H. Yoon e Y.Y. Kim. Element connectivity parameterization for topology optimization of geometrically nonlinear structures. *International Journal of Solids and Structures*, **42**(7):1983–2009, 2005.
- [Yoshimura *et al.* 2002] S. Yoshimura, R. Shioya, H. Noguchi e T. Miyamura. Advanced general-purpose computational mechanics system for large-scale analysis and design. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **149**(1):279–296, 2002.
- [Zhang e Fleury 1997] W. Zhang e C. Fleury. A modification of convex approximation methods for structural optimization. *Computers & Structures*, **64**(1-4):89–95, 1997.
- [Zienkiewicz e Taylor 1989] O.C. Zienkiewicz e R.L. Taylor. *The finite element method*. Vol. I, 4.<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill, Londres, Reino Unido, 1989.